



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2024년09월27일  
(11) 등록번호 10-2710729  
(24) 등록일자 2024년09월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C07F 15/00 (2024.01) C09K 11/06 (2006.01)  
G01N 21/64 (2006.01) G01N 33/58 (2006.01)  
H10K 50/00 (2023.01) H10K 99/00 (2023.01)  
(52) CPC특허분류  
C07F 15/0033 (2013.01)  
C09K 11/06 (2022.01)  
(21) 출원번호 10-2019-0044480  
(22) 출원일자 2019년04월16일  
심사청구일자 2022년04월04일  
(65) 공개번호 10-2020-0121655  
(43) 공개일자 2020년10월26일  
(56) 선행기술조사문헌  
KR1020180036473 A  
Tian-Yi Li 등, Coordination Chemistry  
Reviews, 2018, Vol. 374, pp. 55-92  
KR1020160134579 A\*  
US20160164007 A1\*  
\*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
삼성전자주식회사  
경기도 수원시 영통구 삼성로 129 (매탄동)  
(72) 발명자  
이금희  
경기도 수원시 장안구 만석로 29, 715동 1503호  
(천천동, 비단마을현대성우.우방아파트)  
곽승연  
경기도 수원시 영통구 봉영로1517번길 76, 632동  
1606호 (영통동, 신나무실 신명아파트)  
(뒷면에 계속)  
(74) 대리인  
리앤목특허법인

전체 청구항 수 : 총 14 항

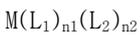
심사관 : 김지은

(54) 발명의 명칭 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 이를 포함한 진단용 조성물

(57) 요약

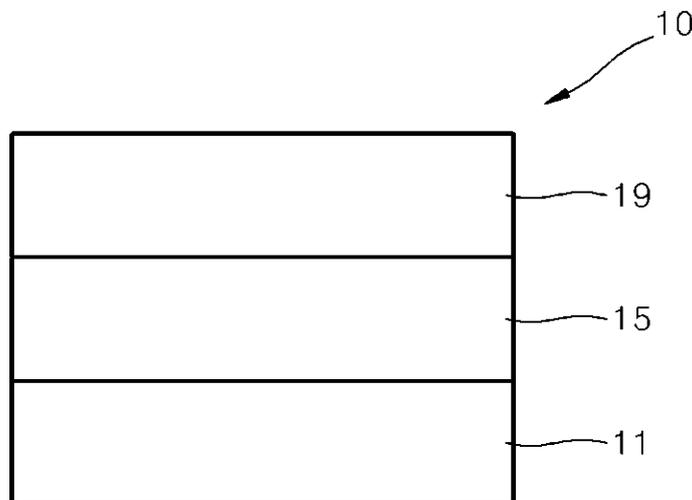
화학식 1로 표시된 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 진단용 조성물이 개시된다:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중 M, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, n1 및 n2에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

*G01N 21/64* (2013.01)

*G01N 33/58* (2020.05)

*H10K 50/12* (2023.02)

*H10K 85/342* (2023.02)

*C09K 2211/185* (2013.01)

(72) 발명자

**곽윤현**

서울특별시 강남구 도산대로30길 16-2, 401호 (논현동)

**권오현**

경기도 수원시 영통구 삼성로 130, 삼성전자소재 단지삼성전자종합기술원(매탄동)

**전아람**

경기도 수원시 영통구 덕영대로 1400, 208동 202호 (망포동, 영통아이파크캐슬2단지)

**최화일**

서울특별시 서초구 방배선행길 2, 101동705호(방배동, 방배래미안아파트)

**황규영**

경기도 안양시 동안구 관평로 88, 803동 902호 (평촌동, 꿈마을아파트)

**최병기**

경기도 화성시 동탄문화센터로 38, 419동 1401호(반송동, 솔빛마을서해그랑블아파트)

**최현호**

서울특별시 송파구 올림픽로 435, 315동 2102호 (신천동, 파크리오)

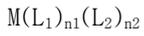
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시된 유기금속(organometallic) 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1 중,

M은 이리듐이고,

L<sub>1</sub>은 하기 화학식 2로 표시된 리간드이고,

n<sub>1</sub>은 1, 또는 2이고, n<sub>1</sub>이 2일 경우 2의 L<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하고,

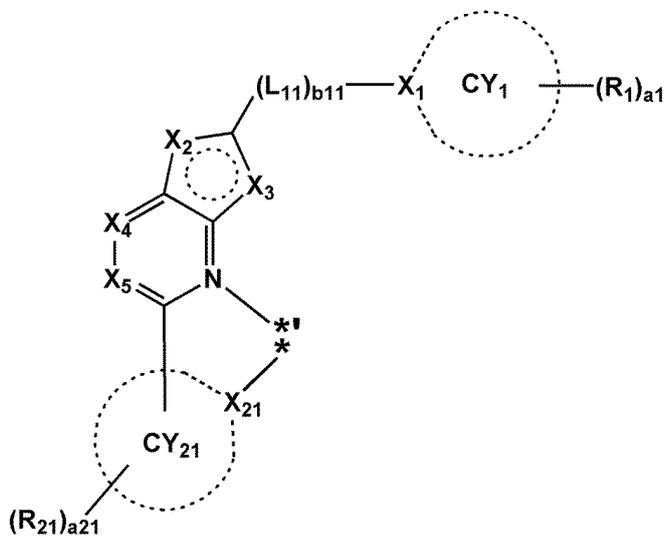
L<sub>2</sub>는 하기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(66) 및 3-1(301) 내지 3-1(309) 중 하나로 표시되는 그룹 중에서 선택되고,

n<sub>2</sub>는 1, 또는 2이고, n<sub>2</sub>가 2일 경우 2의 L<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하고,

L<sub>1</sub>과 L<sub>2</sub>는 서로 상이하고,

n<sub>1</sub>+n<sub>2</sub>는 3이고,

<화학식 2>



상기 화학식 2 중,

X<sub>1</sub>은 C이고,

X<sub>21</sub>은 C이고,

고리 CY<sub>1</sub> 및 고리 CY<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, 시클로펜텐 그룹, 시클로헥센 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹,

디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인텐 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline)이고,

$X_2$  및  $X_3$ 는 서로 독립적으로, 0, S, Se 또는  $C(R_2)$ 이고,  $X_2$  및  $X_3$  중 하나는 0, S 또는 Se이고,

$X_4$ 는  $C(R_4)$ 이고,

$X_5$ 는  $C(R_5)$ 이고,

$R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_4$ ,  $R_5$  및  $R_{21}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_2$ - $C_{60}$ 알케닐기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기, 치환 또는 비치환된  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴티오기, 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 또는  $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 이고,

$a_1$  및  $a_{21}$ 은 서로 독립적으로, 0 내지 10 중에서 선택된 정수이고,

고리  $CY_1$ 과  $R_2$ 는 서로 결합되지 않고,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 서로 결합되지 않고,

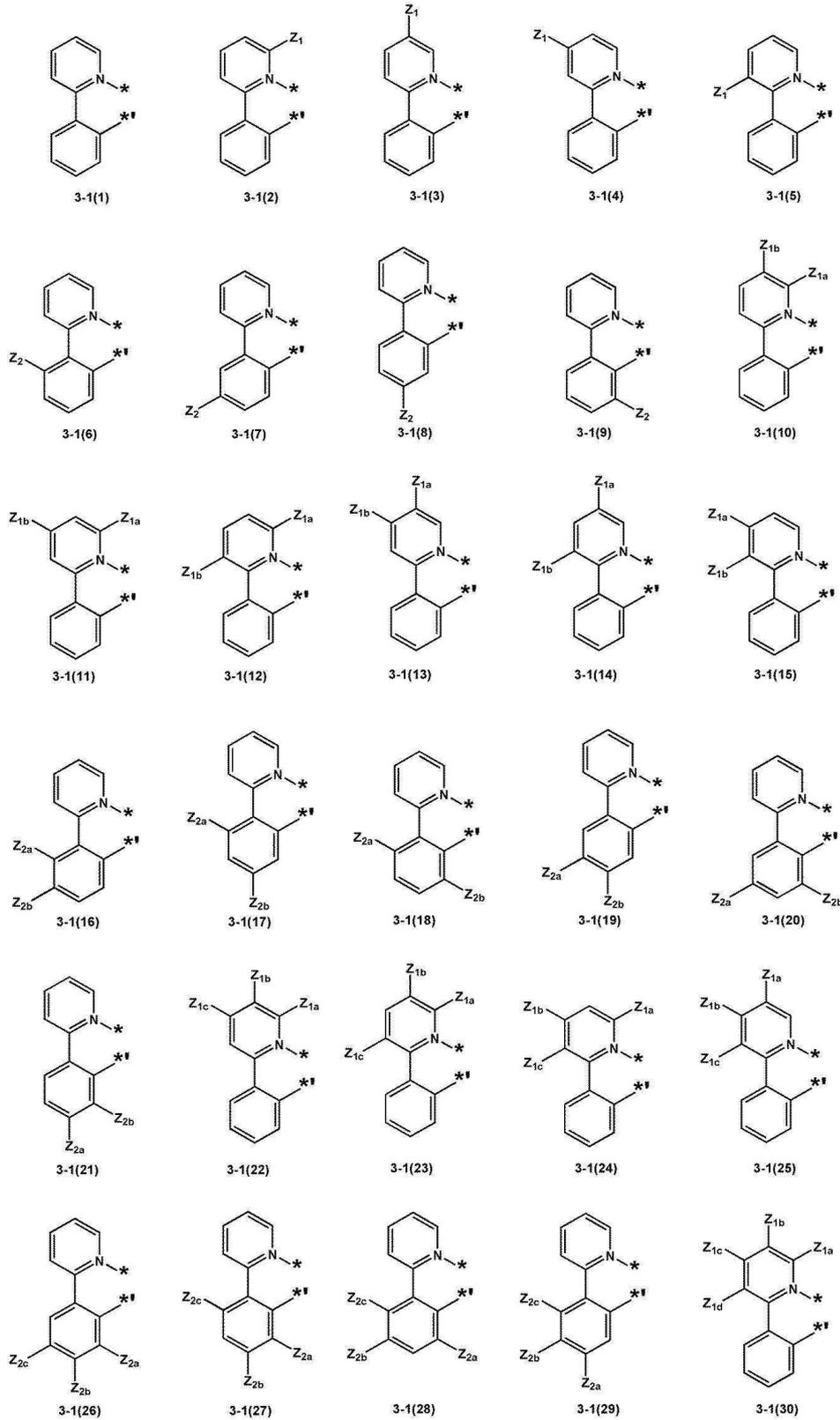
$L_{11}$ 은 적어도 하나의  $R_{10a}$ 로 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의  $R_{10a}$ 로 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹이고,

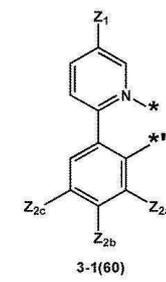
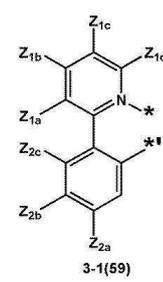
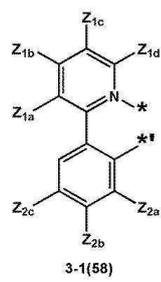
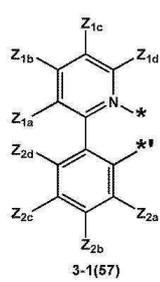
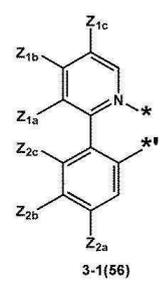
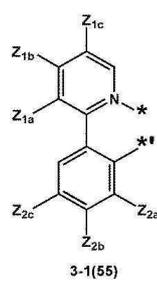
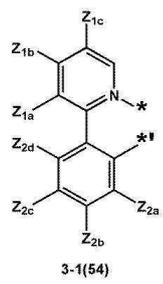
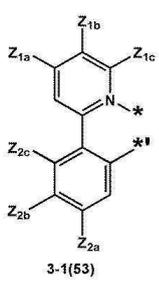
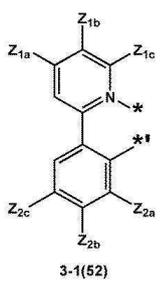
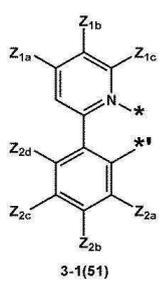
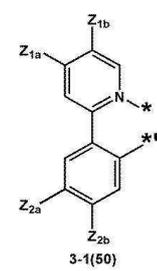
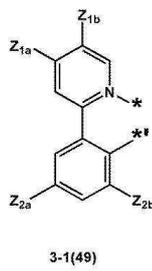
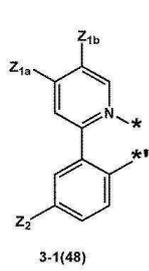
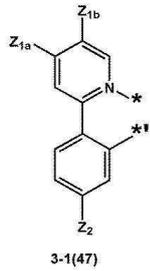
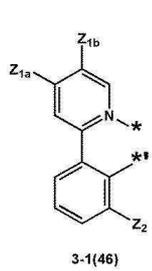
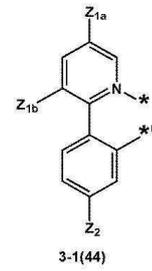
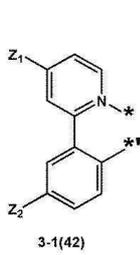
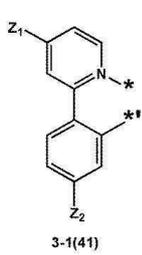
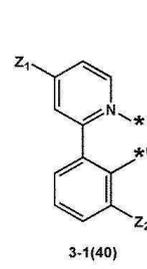
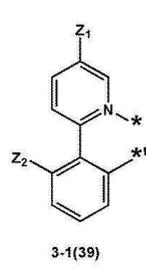
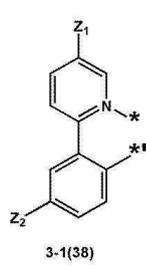
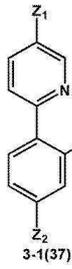
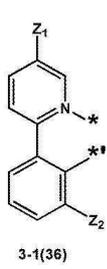
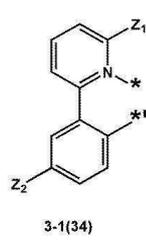
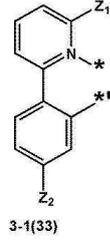
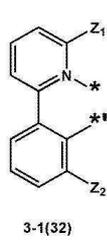
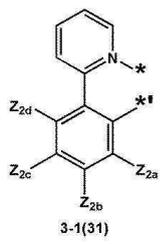
$b_{11}$ 은 0 내지 10의 중에서 선택된 정수이고,  $b_{11}$ 이 0일 경우  $*(L_{11})_{b_{11}}*$ 로 표시된 그룹은 단일 결합이고,  $b_{11}$ 이 2 이상일 경우 2 이상의  $L_{11}$ 은 서로 동일하거나 상이하고,

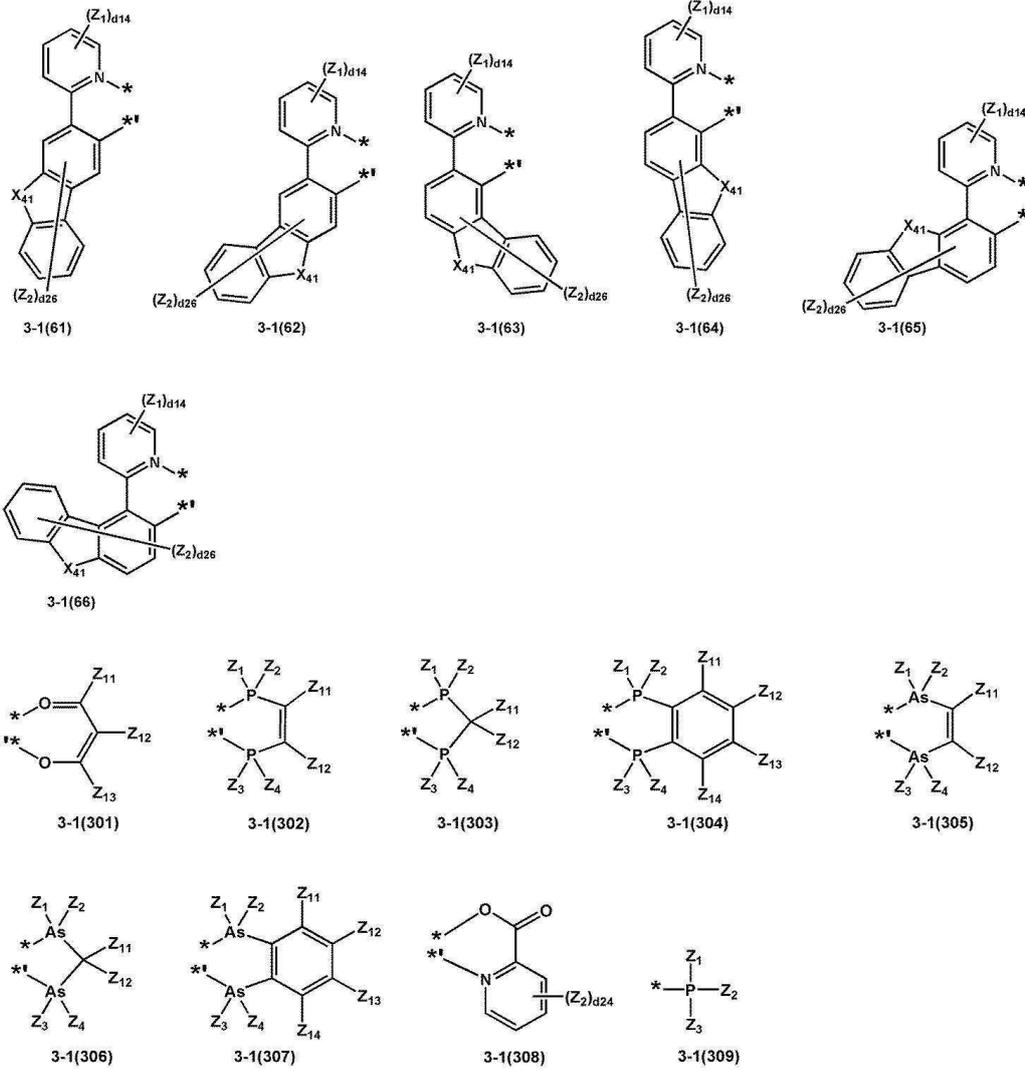
서로 이웃한 복수의  $R_{21}$  중 2개는 선택적으로, 서로 연결되어, 적어도 하나의  $R_{10a}$ 로 치환 또는 비치환된  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의  $R_{10a}$ 로 치환 또는 비치환된  $C_1$ - $C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

$R_{10a}$ 에 대한 설명은 상기  $R_{21}$ 에 대한 설명과 동일하고,

\* 및 \*'은 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,







상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(66) 및 3-1(301) 내지 3-1(309) 중,

X<sub>41</sub>은 O, S, N(Z<sub>21</sub>), C(Z<sub>21</sub>)(Z<sub>22</sub>) 또는 Si(Z<sub>21</sub>)(Z<sub>22</sub>)이고,

Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>4</sub>, Z<sub>1a</sub>, Z<sub>1b</sub>, Z<sub>1c</sub>, Z<sub>1d</sub>, Z<sub>2a</sub>, Z<sub>2b</sub>, Z<sub>2c</sub>, Z<sub>2d</sub>, Z<sub>21</sub>, Z<sub>22</sub>, 및 Z<sub>11</sub> 내지 Z<sub>14</sub>에 대한 설명은 R<sub>21</sub>에 대한 설명과 동일하고,

d<sub>14</sub>는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

d<sub>26</sub>은 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

\* 및 \*'은 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,

상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기는,

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 및 -Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>), 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합 다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합 다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, 및 -Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>), 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;

-Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>); 또는

이의 임의의 조합;

이고,

상기 Q<sub>3</sub> 내지 Q<sub>5</sub>, Q<sub>13</sub> 내지 Q<sub>15</sub>, Q<sub>23</sub> 내지 Q<sub>25</sub> 및 Q<sub>33</sub> 내지 Q<sub>35</sub>는 서로 독립적으로,

-CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 또는 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;

중수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 또는 나프틸기;이다.

**청구항 2**

삭제

**청구항 3**

삭제

**청구항 4**

제1항에 있어서,

상기 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>21</sub> 및 R<sub>10a</sub>는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]pentyl), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexyl), 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]heptyl), 비시클로[2.2.2]옥틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 시클로옥테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]pentyl), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexyl), 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]heptyl), 비시클로[2.2.2]옥틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜틸기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸

일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및 -Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 시클로옥세테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]pentyl), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexyl), 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]heptyl), 비시클로[2.2.2]옥틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기; 또는

-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>);

이고,

Q<sub>3</sub> 내지 Q<sub>5</sub> 및 Q<sub>33</sub> 내지 Q<sub>35</sub>는 서로 독립적으로,

-CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H, -CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>, -CHDCH<sub>3</sub>, -CHDCD<sub>2</sub>H, -CHDCDH<sub>2</sub>, -CHDCD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H 또는 -CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>;

중수소, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 또는 나프틸기;

인, 유기금속 화합물.

**청구항 5**

제1항에 있어서,

상기 화학식 2의 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,

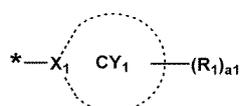
수소, 중수소, -F, 또는 시아노기; 또는

중수소, -F, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 또는 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기;

인, 유기금속 화합물.

**청구항 6**

제1항에 있어서,



상기 화학식 2의 로 표시된 그룹이 a1개의 R<sub>1</sub>으로 치환 또는 비치환된, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌

일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기이고,

상기 화학식 2의 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,

수소, 중수소, -F, 또는 시아노기; 또는

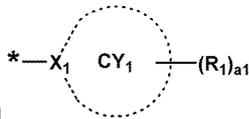
중수소, -F, CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노네닐기, 이소노네닐기, sec-노네닐기, tert-노네닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기 또는 시클로헵테닐기;

이고,

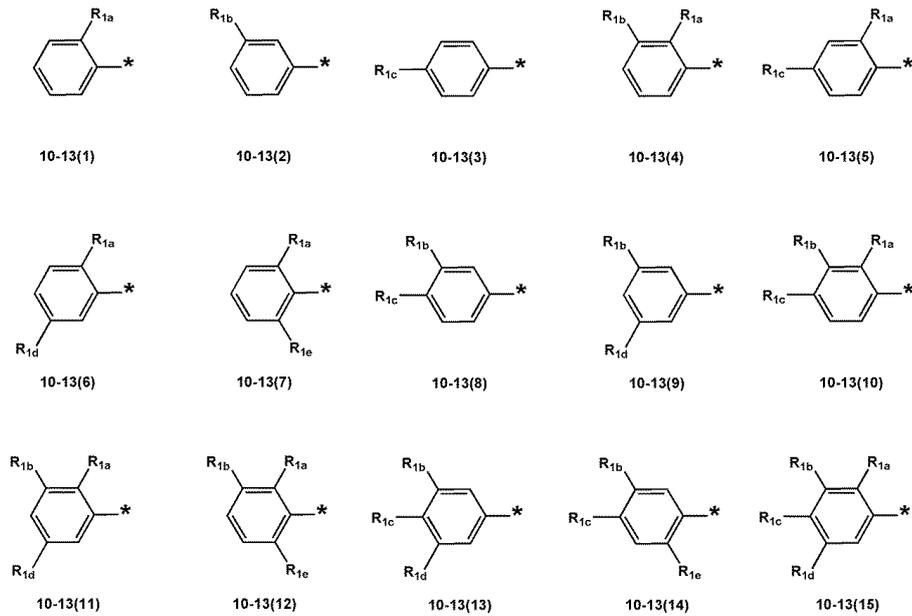
상기 a1은 0 내지 5의 정수 중에서 선택된, 유기금속 화합물.

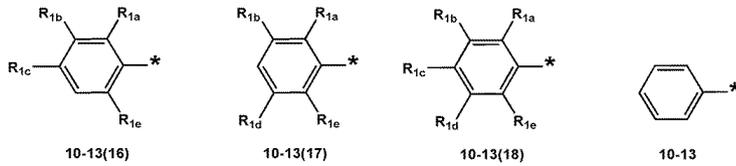
**청구항 7**

제1항에 있어서,



상기 로 표시된 그룹이 하기 화학식 10-13(1) 내지 10-13(18) 및 10-13 중 하나로 표시된 그룹인, 유기금속 화합물:

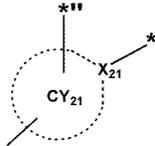




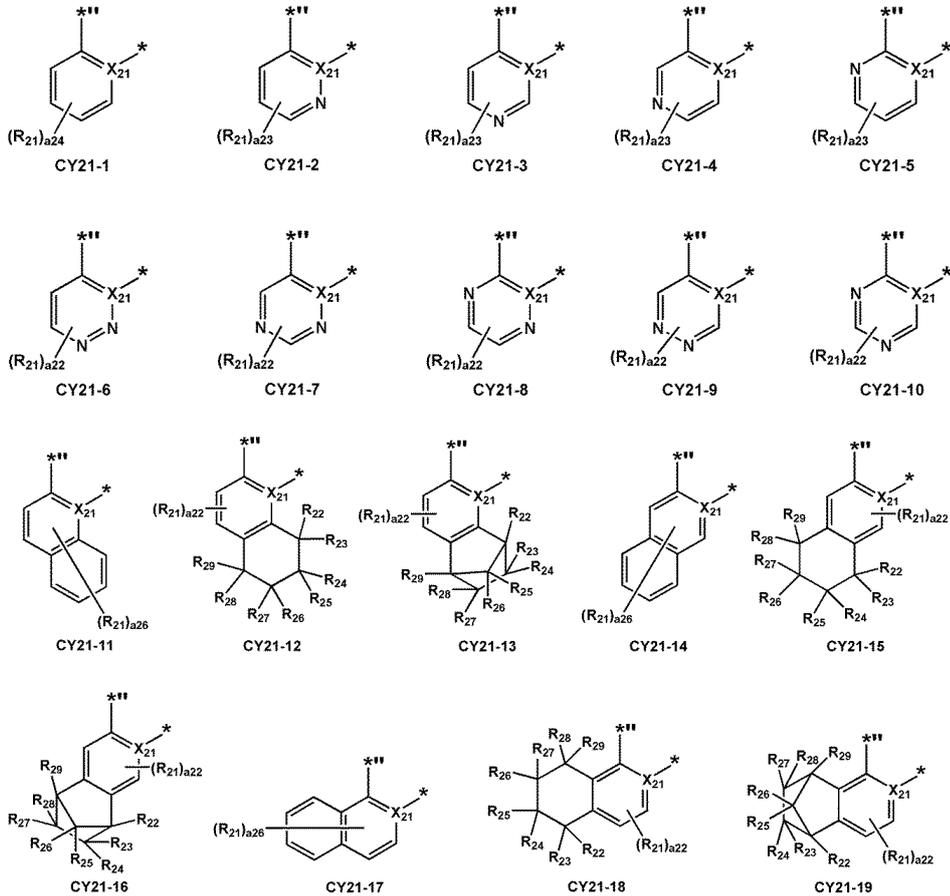
상기 화학식 10-13(1) 내지 10-13(18) 중 R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1e</sub>에 대한 설명은 각각 제1항 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명과 동일하되, R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1e</sub>은 수소가 아니고, \*는 이웃한 탄소 원자와의 결합 사이트이다.

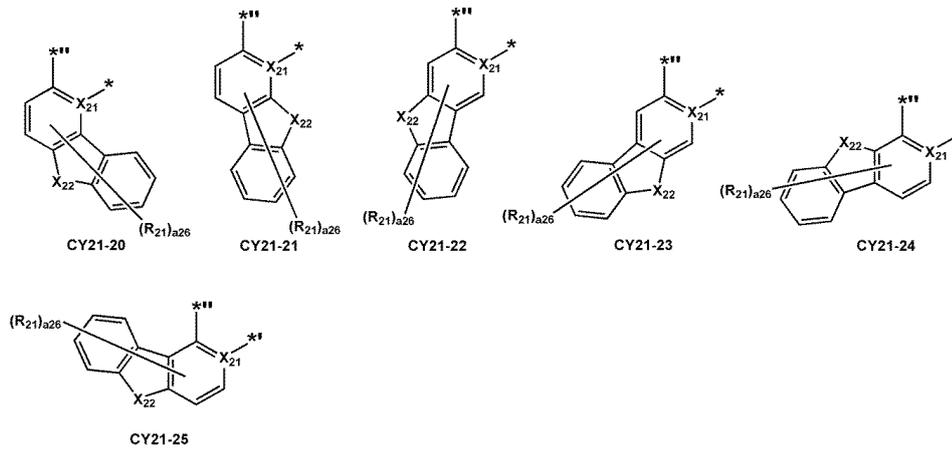
청구항 8

제1항에 있어서,



상기 화학식 2 중 (R<sub>21</sub>)<sub>a21</sub> 로 표시된 그룹이 하기 화학식 CY21-1 내지 CY21-25 중 하나로 표시된 그룹인, 유기금속 화합물:





상기 화학식 CY21-1 내지 CY21-25 중,

$X_{21}$  및  $R_{21}$ 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

$X_{22}$ 는  $C(R_{22})(R_{23})$ ,  $N(R_{22})$ , O, S 또는  $Si(R_{22})(R_{23})$ 이고,

$R_{22}$  내지  $R_{29}$ 에 대한 설명은 각각 제1항 중  $R_{21}$ 에 대한 설명과 동일하고,

$a_{26}$ 은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

$a_{24}$ 은 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

$a_{23}$ 은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

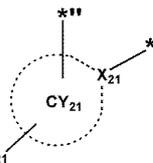
$a_{22}$ 은 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

"\*"은 화학식 2 중 이웃한 6원환의 탄소 원자와의 결합 사이트이고,

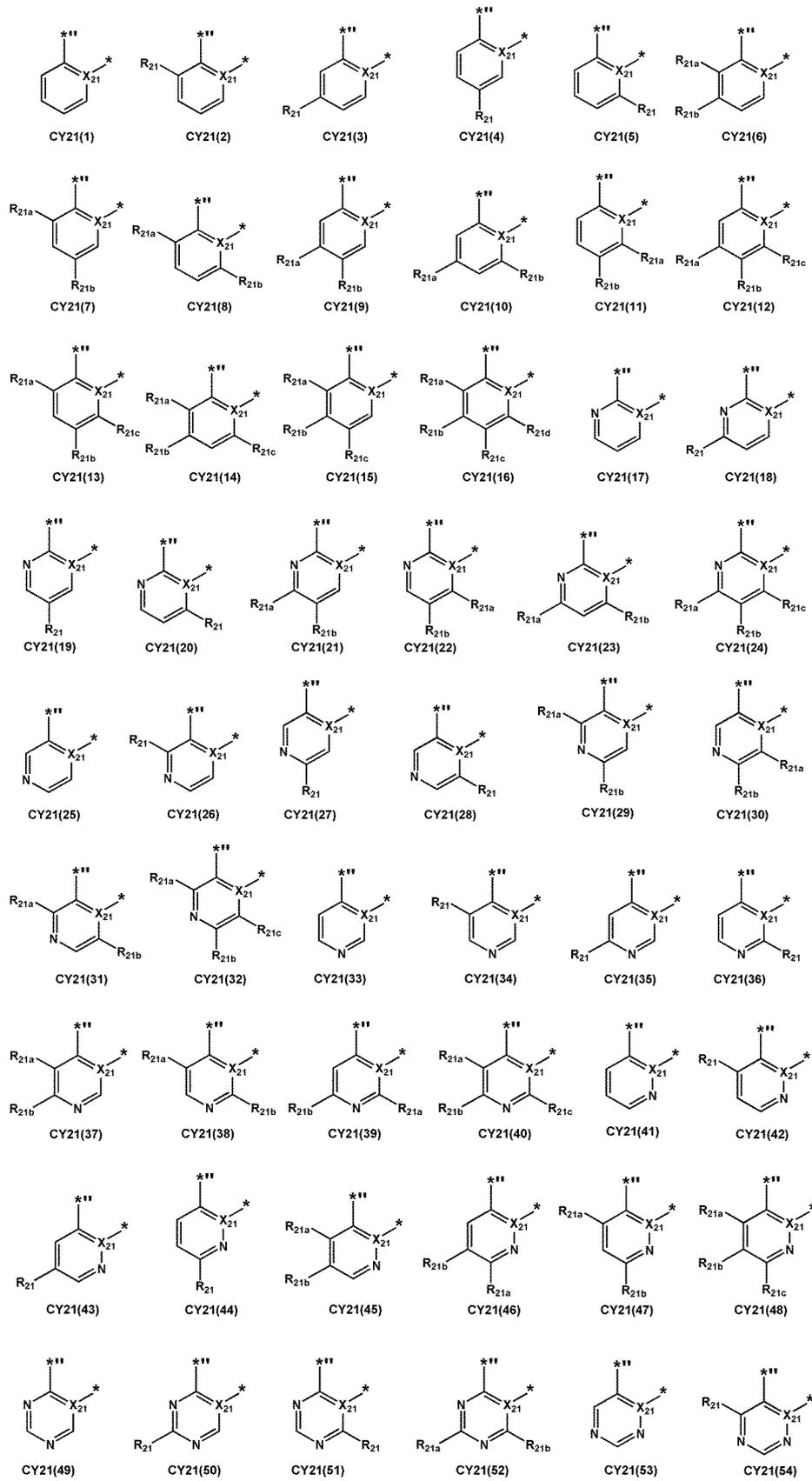
"#는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

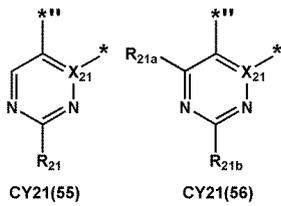
### 청구항 9

제8항에 있어서,



상기 화학식 2 중  $(R_{21})_{a_{21}}$  로 표시된 그룹이 하기 화학식 CY21(1) 내지 CY21(56) 중 하나로 표시된 그룹 또는 상기 화학식 CY21-20 내지 CY21-25 중 하나로 표시된 그룹인, 유기금속 화합물:





상기 화학식 CY21(1) 내지 CY21(56) 중,

$X_{21}$  및  $R_{21}$ 에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,

$R_{21a}$  내지  $R_{21d}$ 에 대한 설명은 각각 제1항 중  $R_{21}$ 에 대한 설명과 동일하되,  $R_{21}$  및  $R_{21a}$  내지  $R_{21d}$ 는 수소가 아니고,

\*"은 화학식 2 중 이웃한 6원환의 탄소 원자와의 결합 사이트이고,

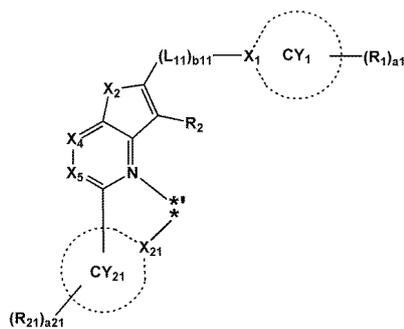
\*'는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

**청구항 10**

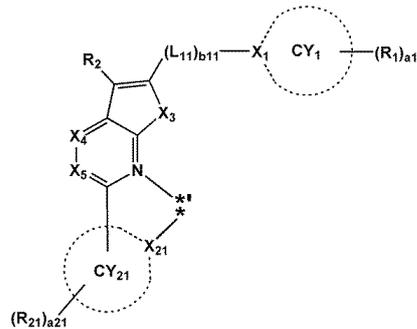
제1항에 있어서,

상기  $L_1$ 이 하기 화학식 2A 또는 2B로 표시된 리간드인, 유기금속 화합물:

<화학식 2A>



<화학식 2B>



상기 화학식 2A 및 2B 중  $X_1$ ,  $X_{21}$ , 고리  $CY_1$ , 고리  $CY_{21}$ ,  $X_4$ ,  $X_5$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_{21}$ ,  $a_1$ ,  $a_{21}$ ,  $L_{11}$ ,  $b_{11}$ , \* 및 \*'에 대한 설명은 각각 제1항에 기재된 바와 동일하고,  $X_2$  및  $X_3$ 는 O, S 또는 Se이다.

**청구항 11**

삭제

**청구항 12**

삭제

**청구항 13**

삭제

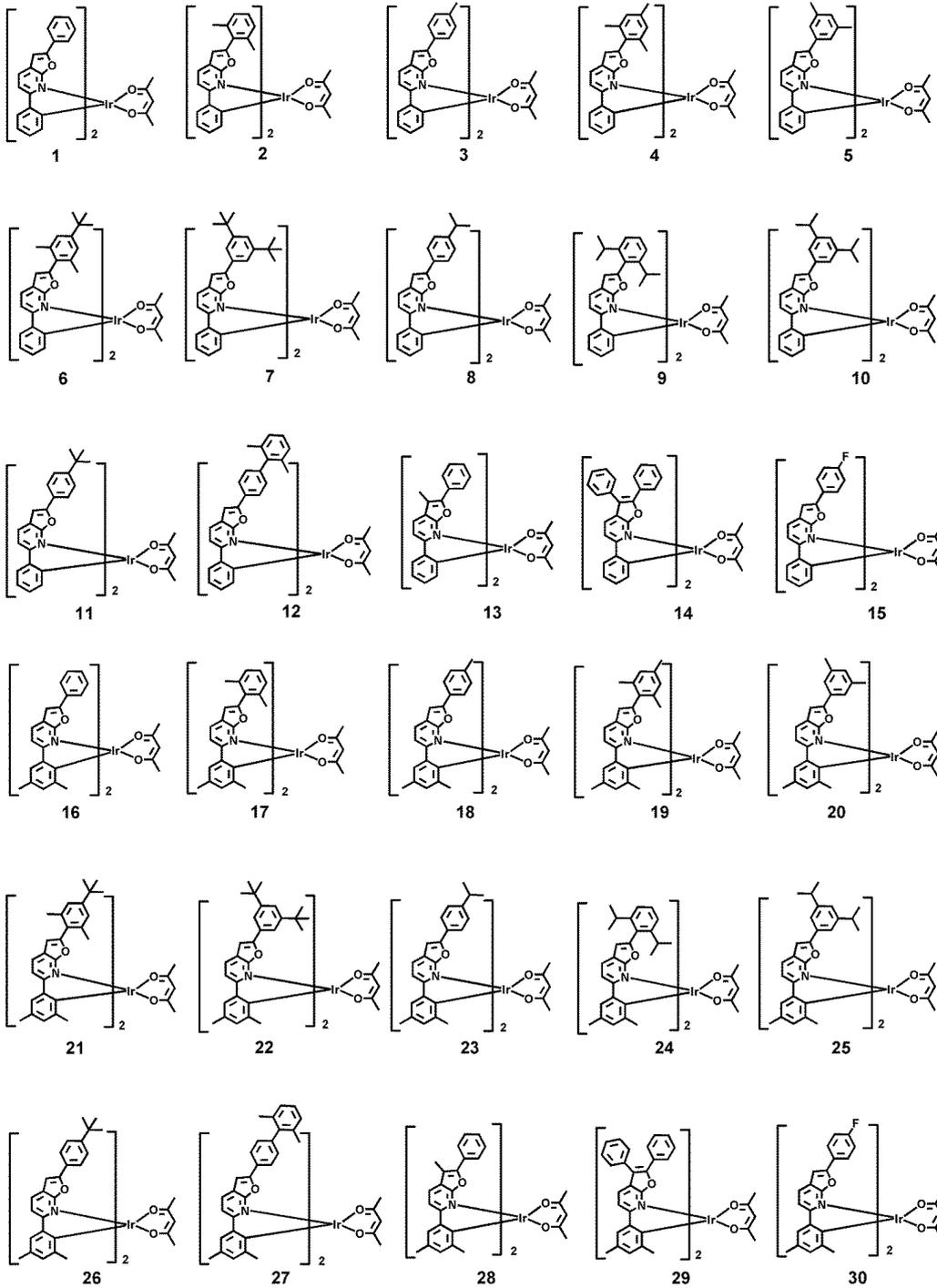
**청구항 14**

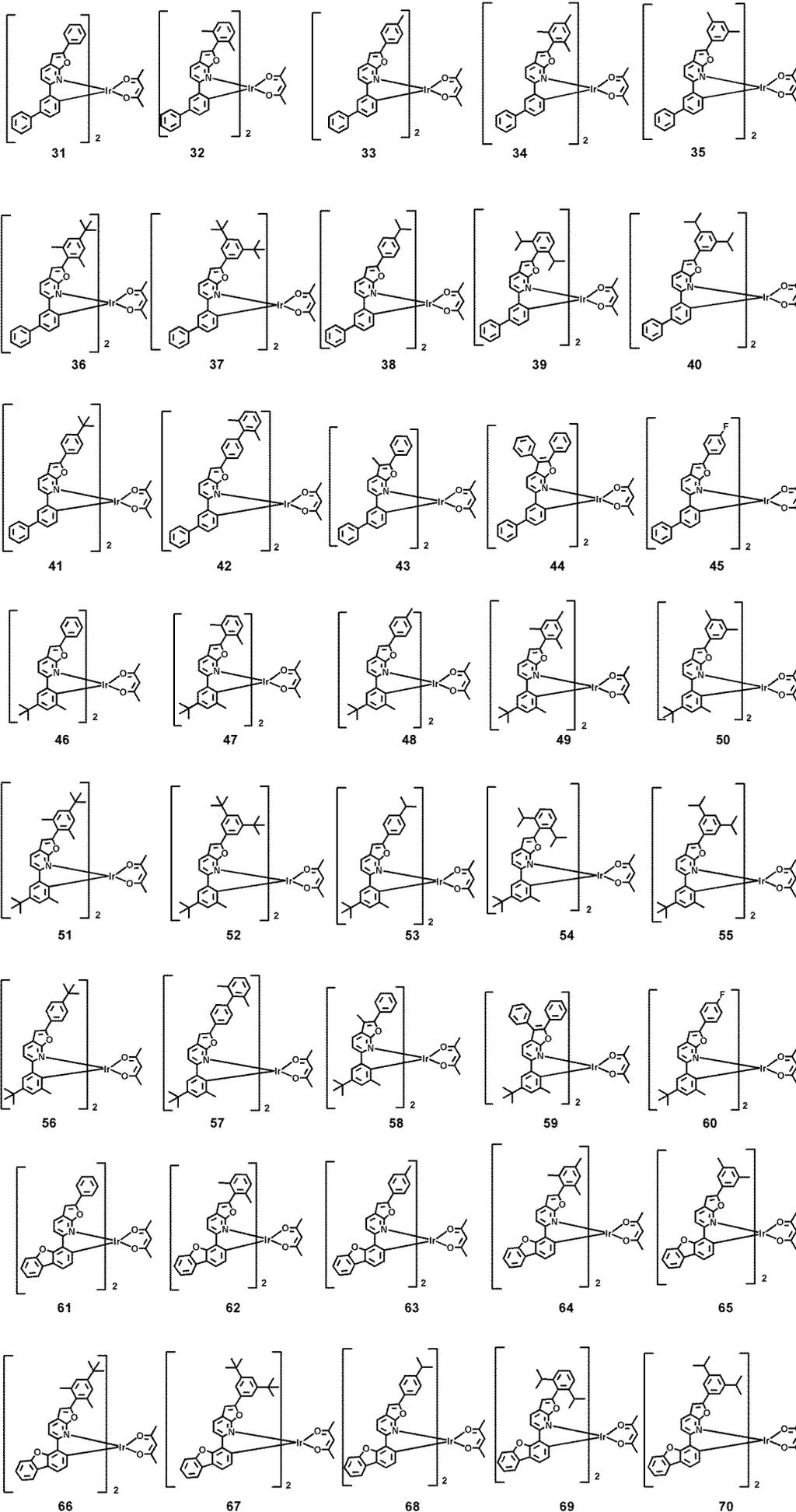
삭제

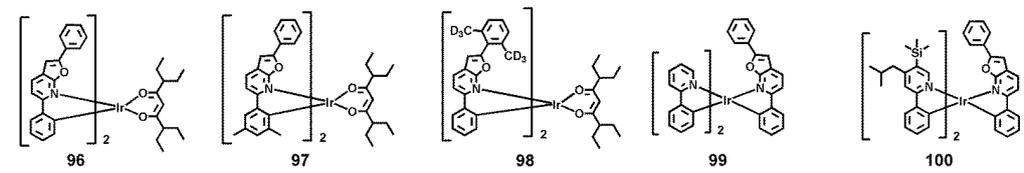
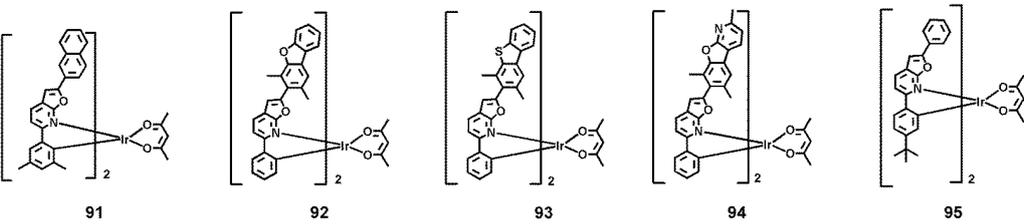
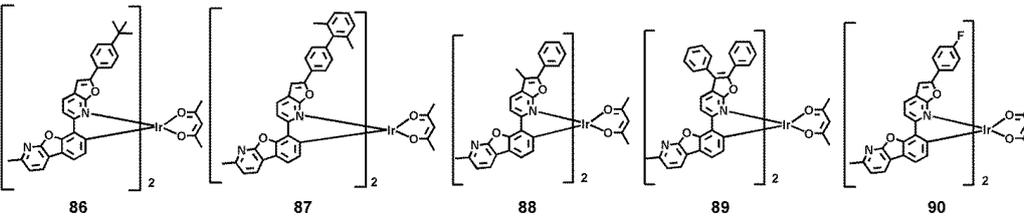
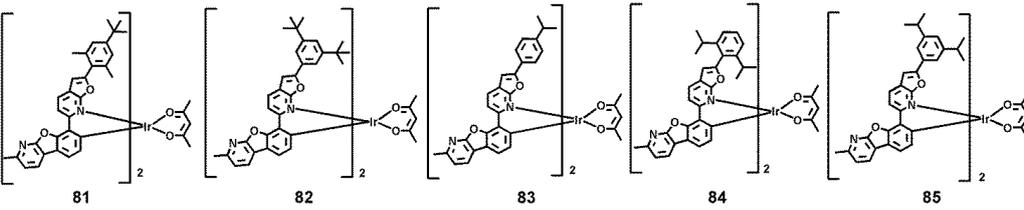
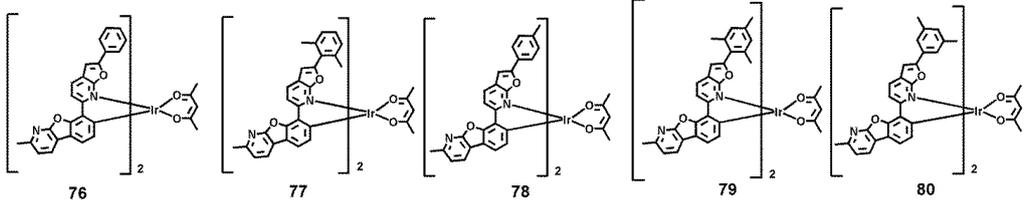
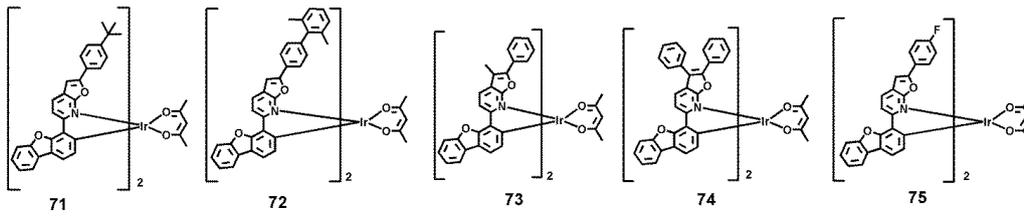
**청구항 15**

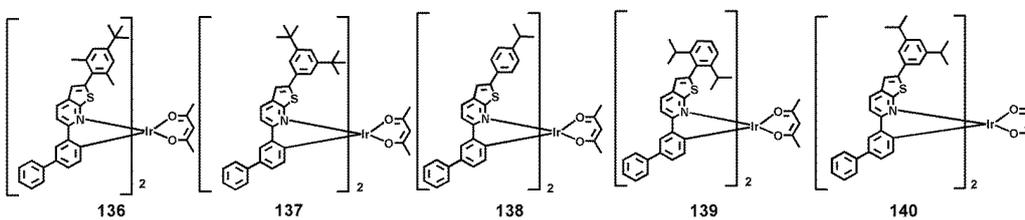
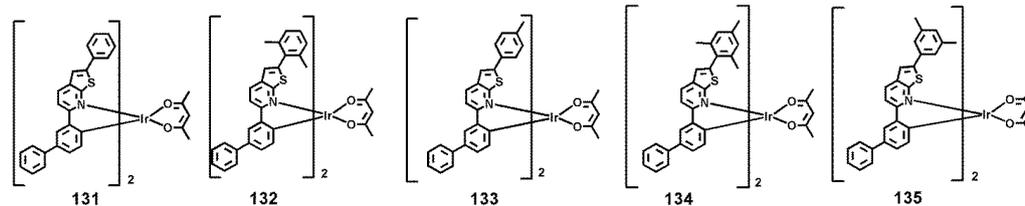
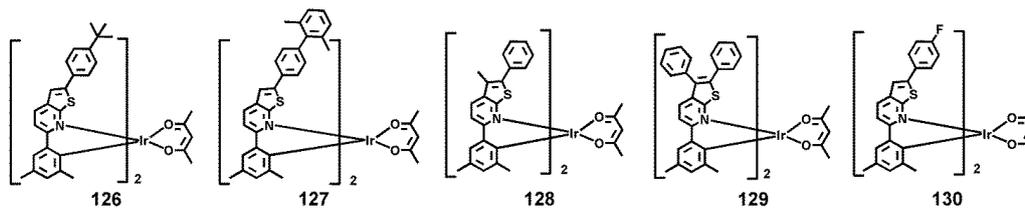
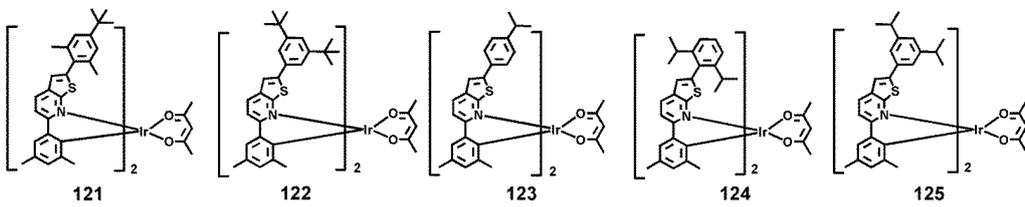
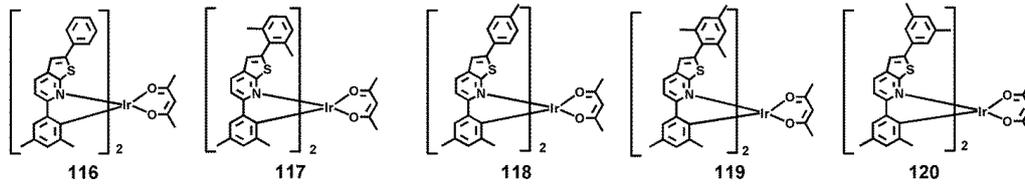
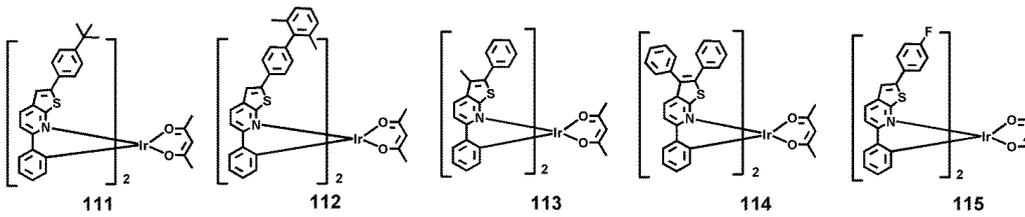
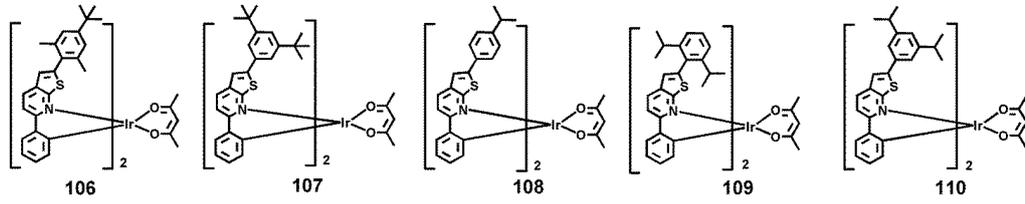
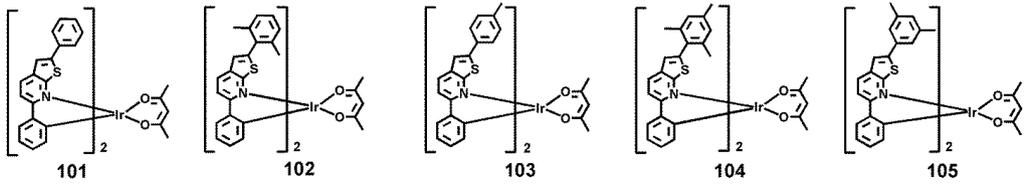
제1항에 있어서,

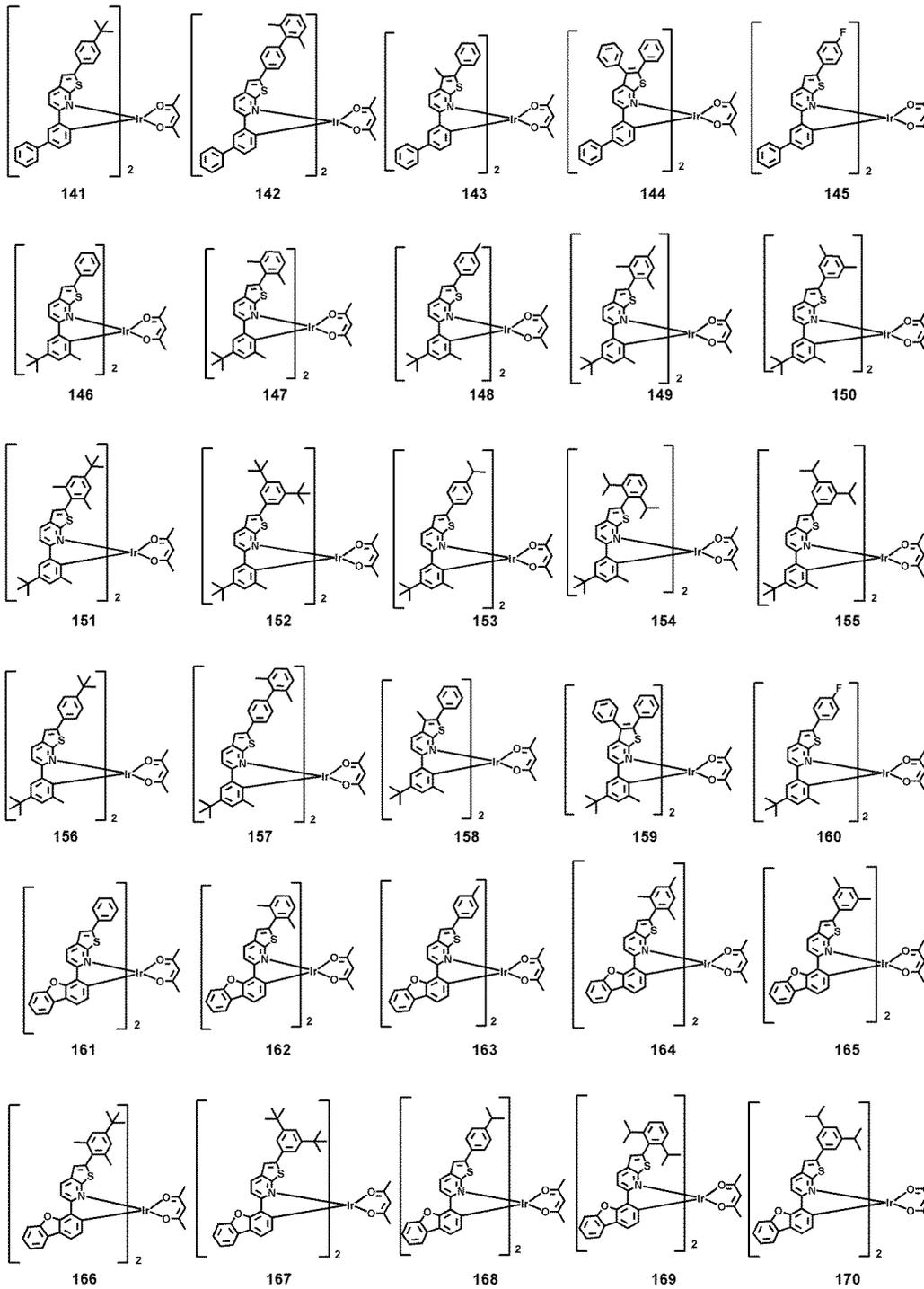
하기 화합물 1 내지 420 중 하나인, 유기금속 화합물:

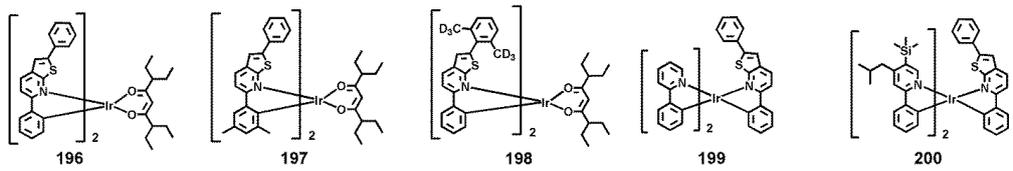
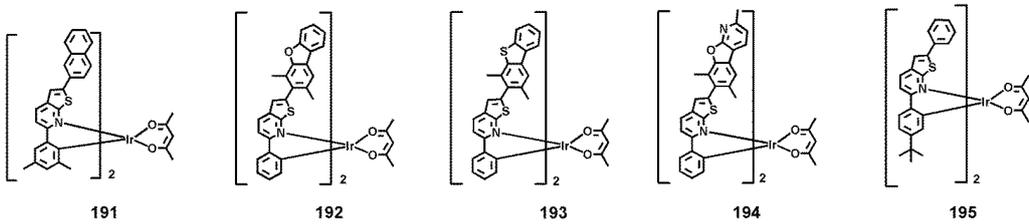
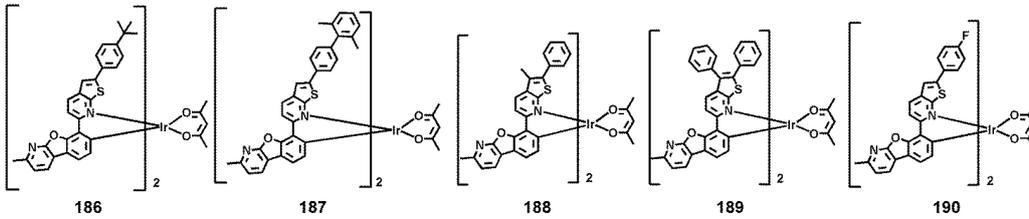
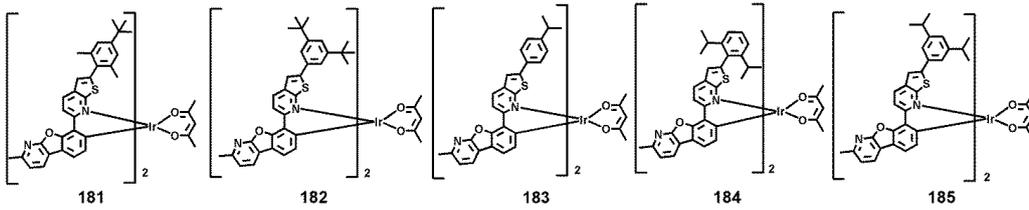
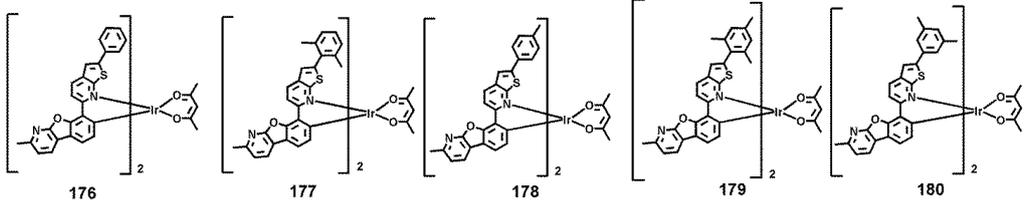
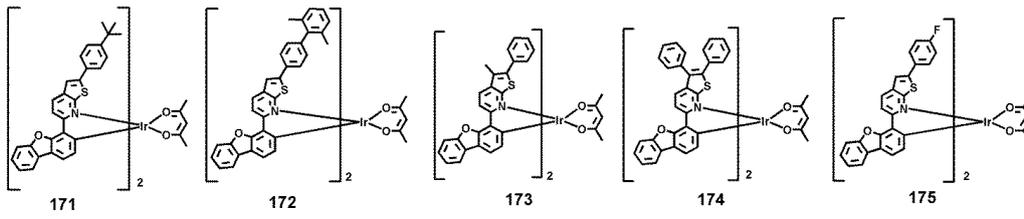


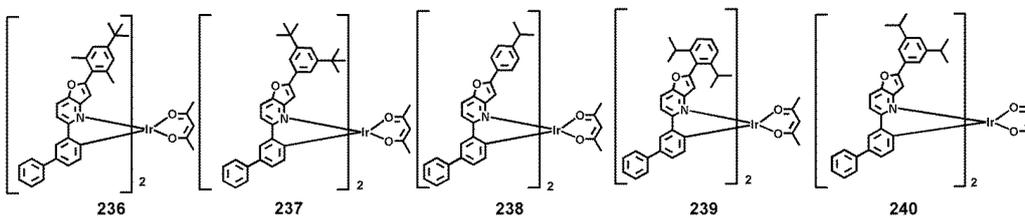
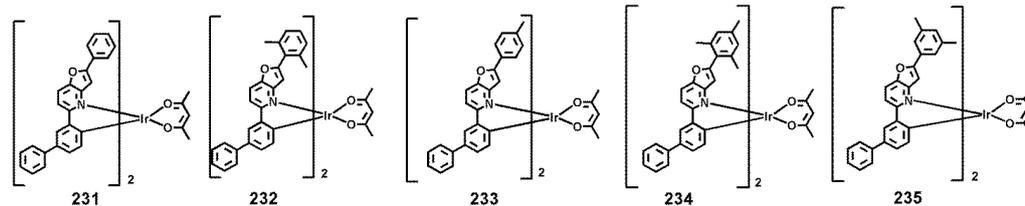
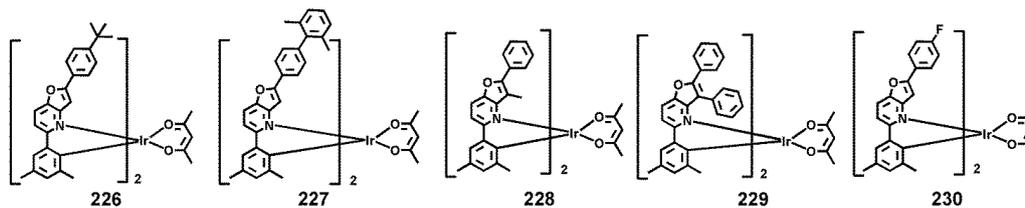
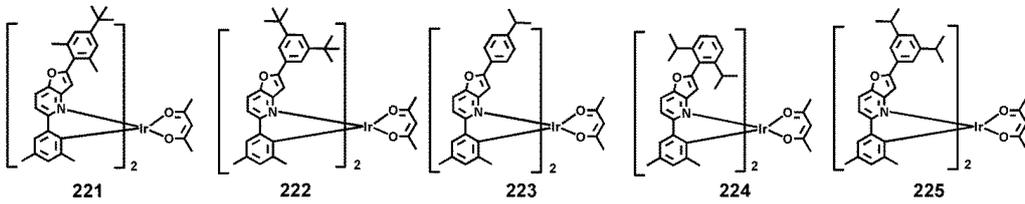
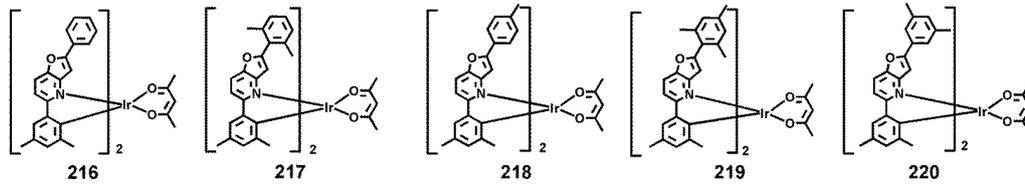
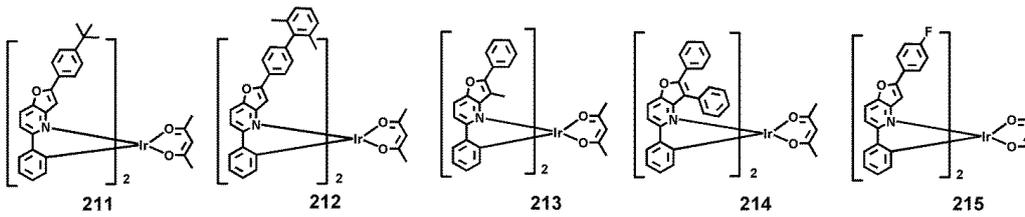
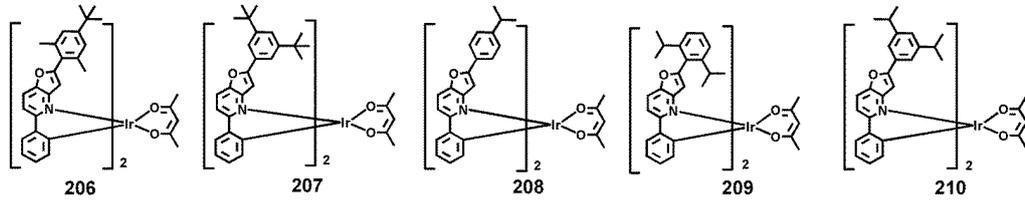
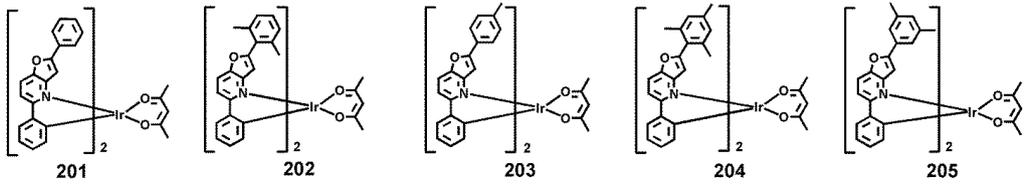


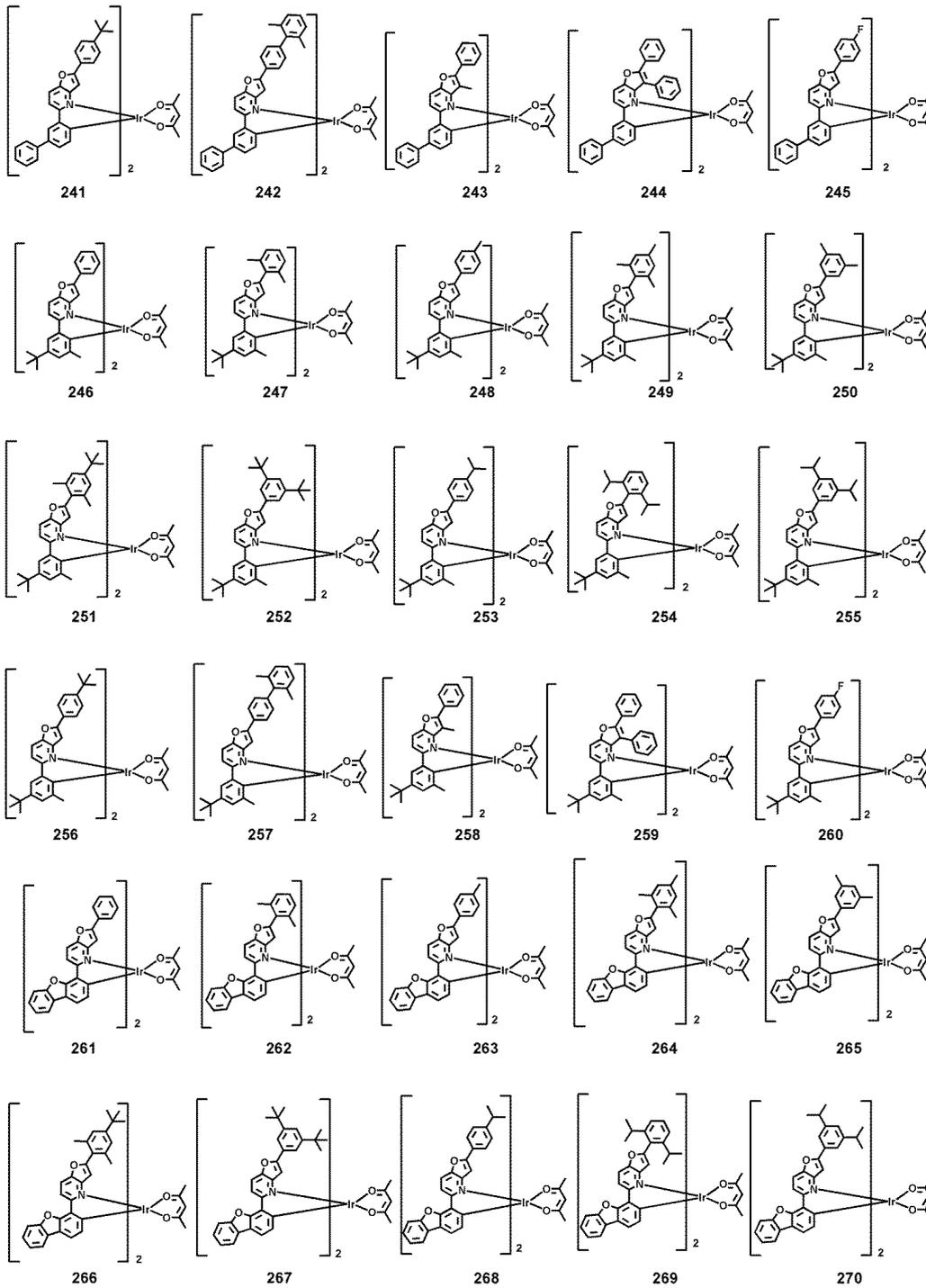


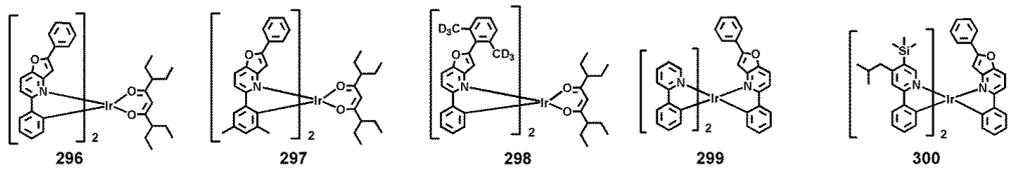
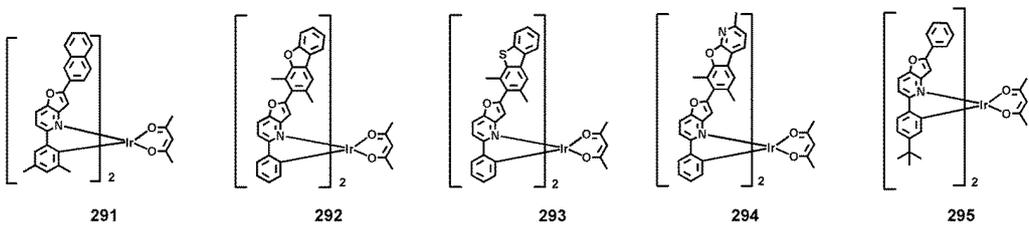
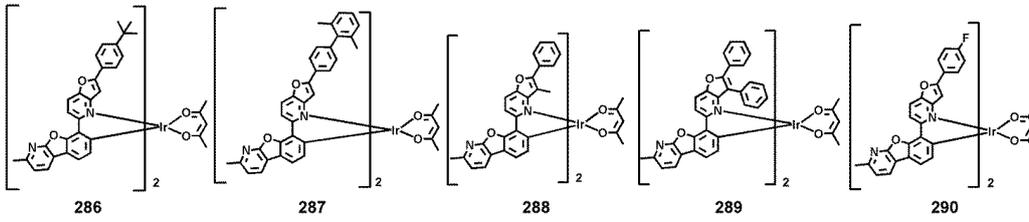
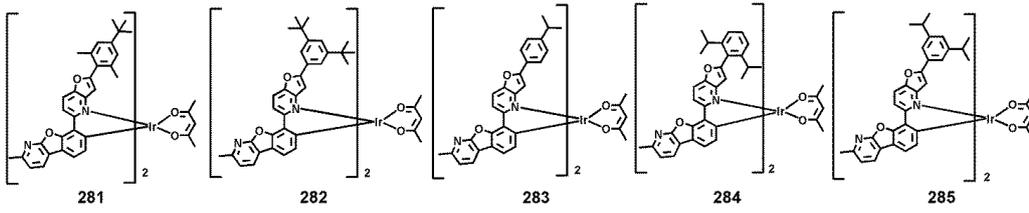
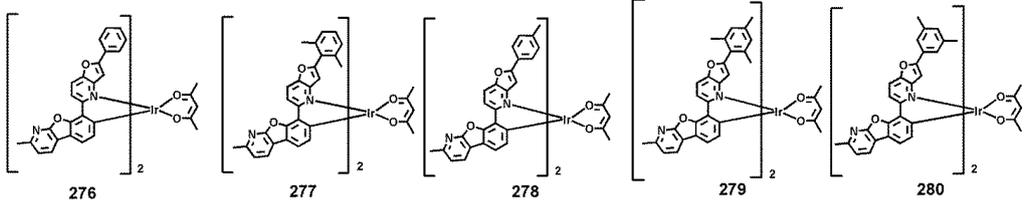
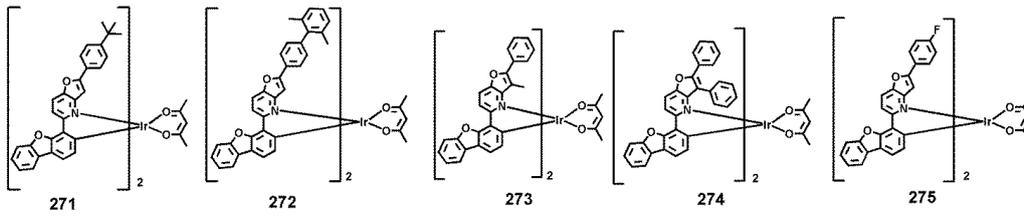


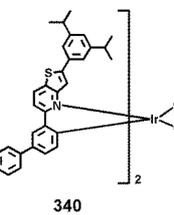
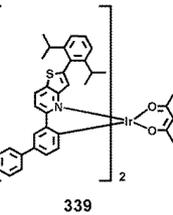
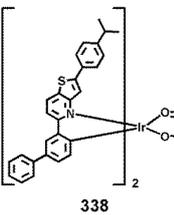
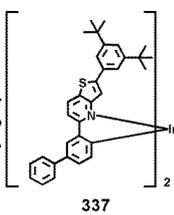
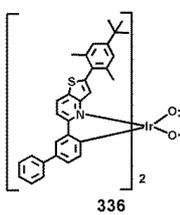
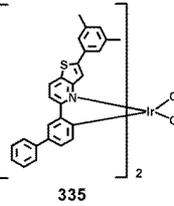
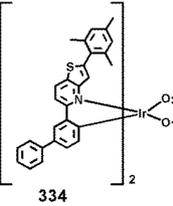
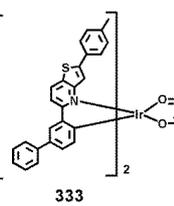
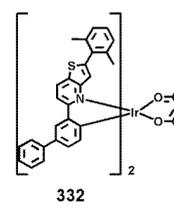
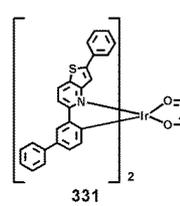
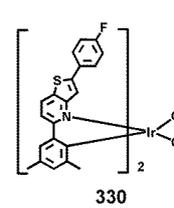
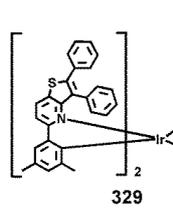
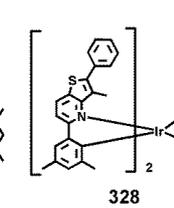
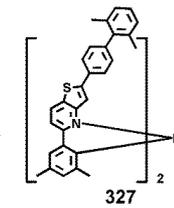
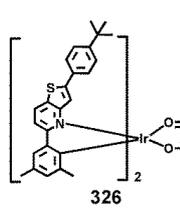
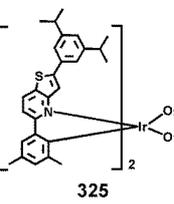
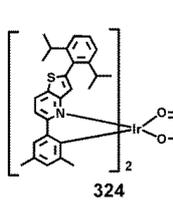
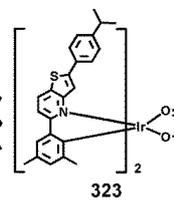
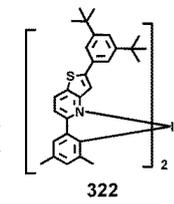
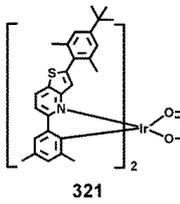
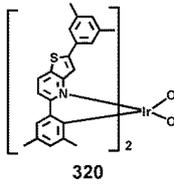
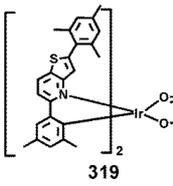
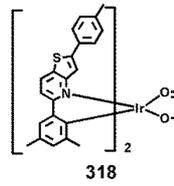
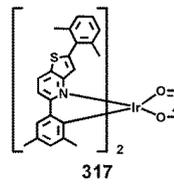
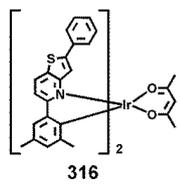
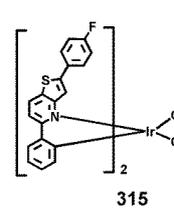
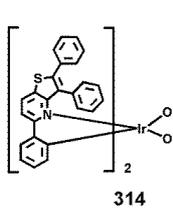
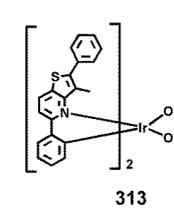
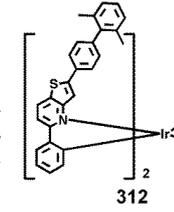
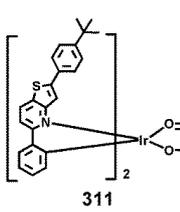
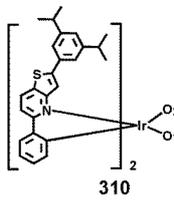
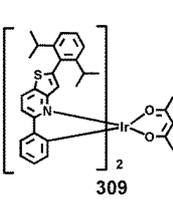
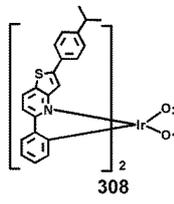
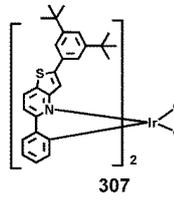
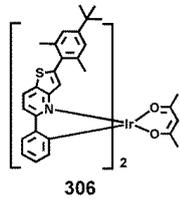
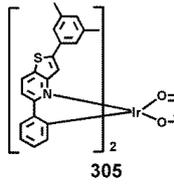
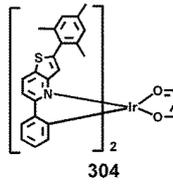
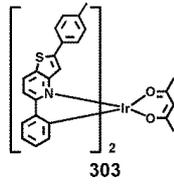
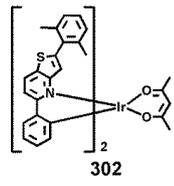
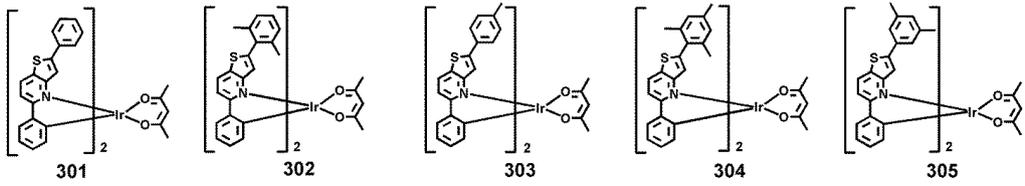


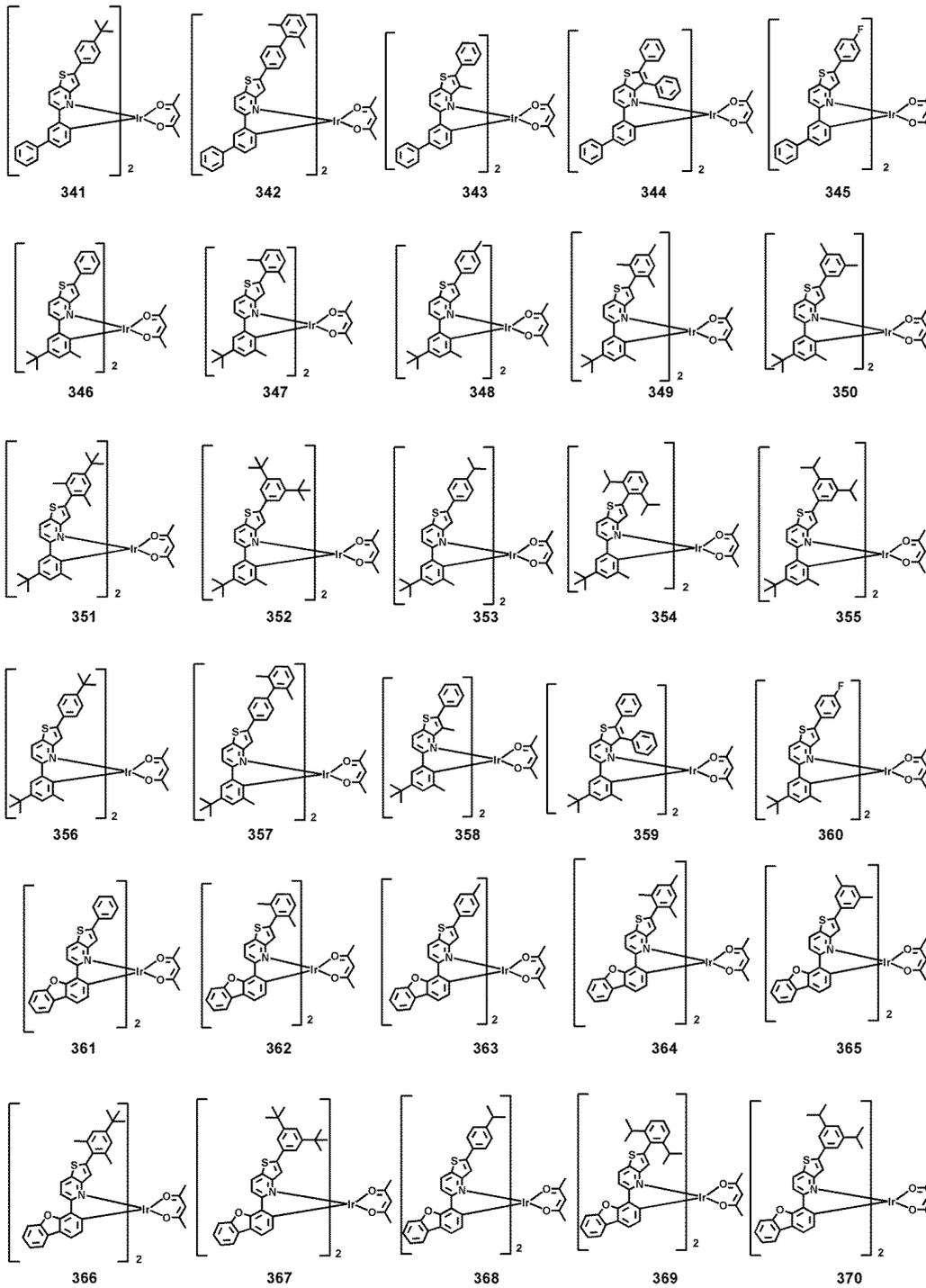


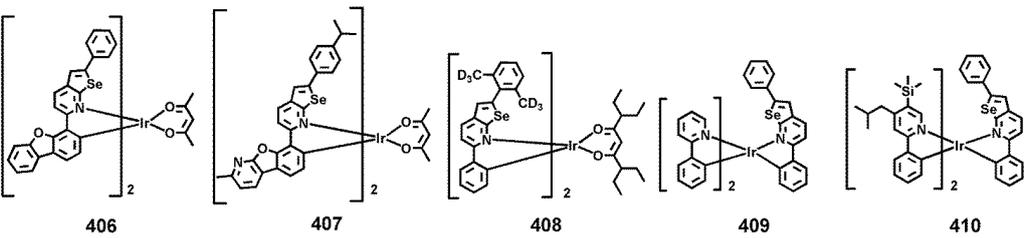
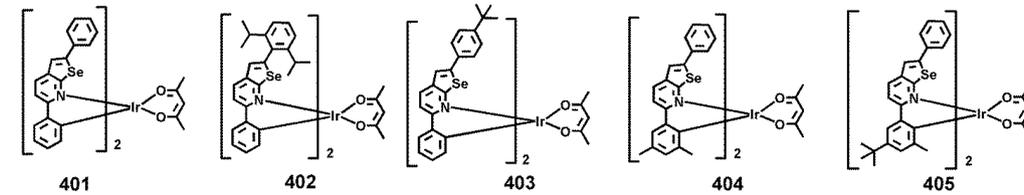
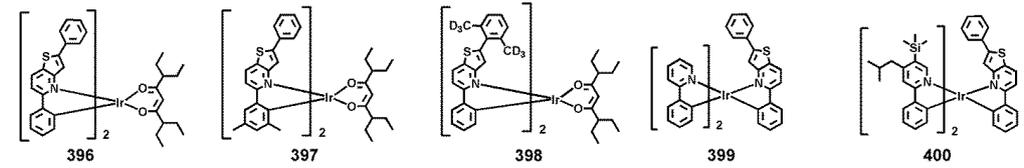
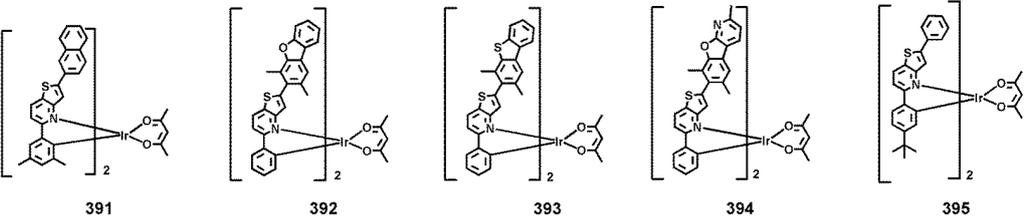
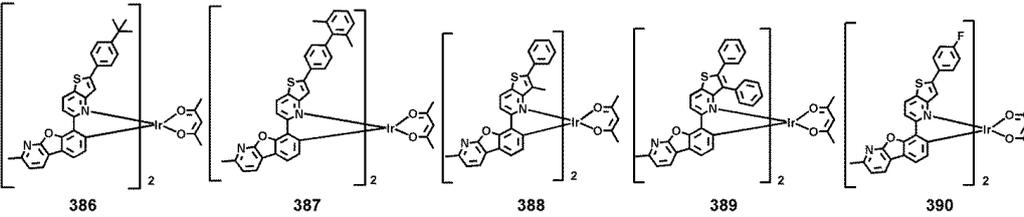
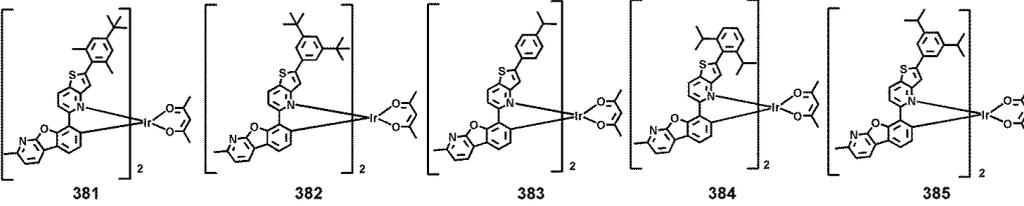
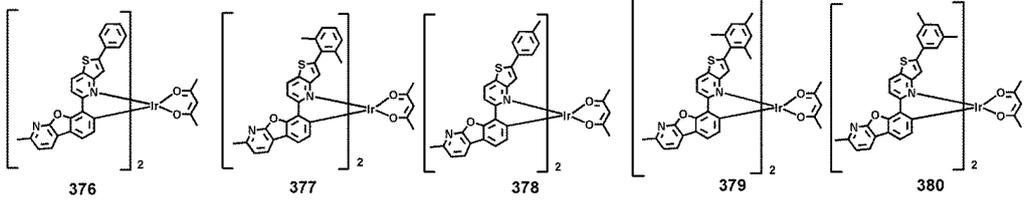
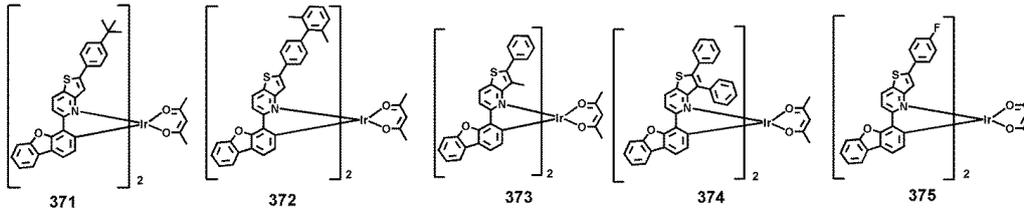


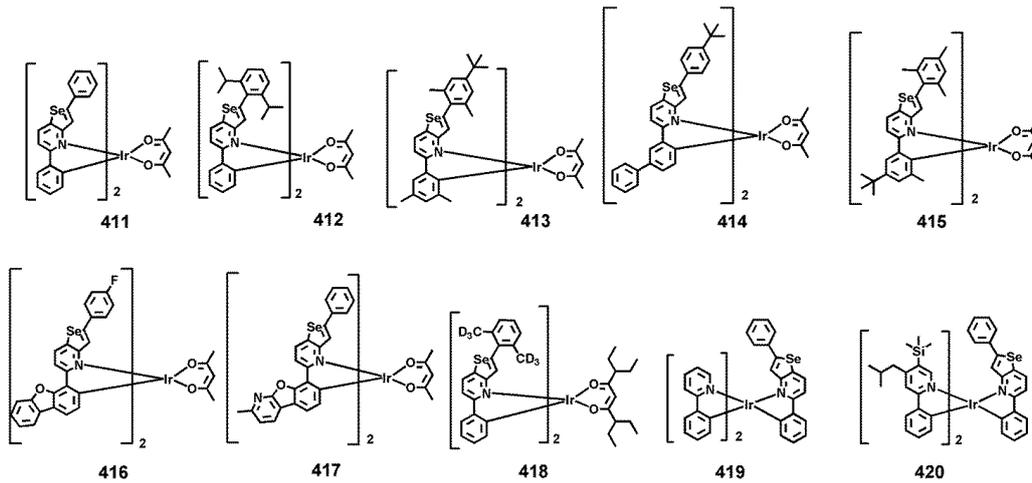












**청구항 16**

제1전극;

제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함한 유기층;

을 포함하고,

상기 유기층은 제1항, 제4항 내지 제10항, 및 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자.

**청구항 17**

제16항에 있어서,

상기 제1전극은 애노드이고,

상기 제2전극은 캐소드이고,

상기 유기층은, 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 전자 수송 영역을 더 포함하고,

상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고,

상기 전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층, 또는 이의 임의의 조합을 포함한, 유기 발광 소자.

**청구항 18**

제16항에 있어서,

상기 유기금속 화합물이 상기 발광층에 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

**청구항 19**

제18항에 있어서,

상기 발광층이 호스트를 더 포함하고, 상기 호스트의 함유 중량이 상기 유기금속 화합물의 함유 중량보다 큰, 유기 발광 소자.

**청구항 20**

제1항, 제4항 내지 제10항 및 제15항 중 어느 한 항의 유기금속 화합물을 포함한, 생물학적 물질의 모니터링, 센싱 또는 검출용 조성물.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 유기금속 화합물, 이를 포함한 유기 발광 소자 및 이를 포함한 진단용 조성물이 제시된다.

**배경 기술**

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting device)는 자발광형 소자로서, 시야각, 응답 시간, 휘도, 구동 전압 및 응답 속도 등이 우수하고, 다색화가 가능하다.

[0003] 일예에 따르면, 유기 발광 소자는, 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재되고 발광층을 포함한 유기층 포함할 수 있다. 상기 애노드와 발광층 사이에는 정공 수송 영역이 구비될 수 있고, 상기 발광층과 캐소드 사이에는 전자 수송 영역이 구비될 수 있다. 상기 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자 수송 영역을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자는 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exciton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

[0004] 한편, 각종 세포, 단백질 등과 같은 생물학적 물질의 모니터링, 센싱, 검출 등에도 발광 화합물, 예를 들면, 인광 발광 화합물이 사용될 수 있다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

[0005] 신규 유기금속 화합물, 이를 채용한 유기 발광 소자 및 이를 채용한 진단용 조성물을 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

[0006] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시된 유기금속(organometallic) 화합물이 제공된다:

[0007] <화학식 1>



[0009] 상기 화학식 1 중,

[0010] M은 전이 금속이고,

[0011] L<sub>1</sub>은 하기 화학식 2로 표시된 리간드이고,

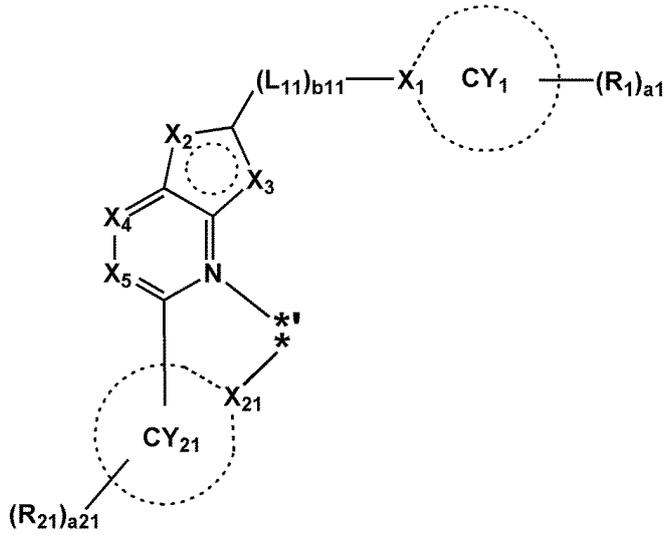
[0012] n<sub>1</sub>은 1, 2 또는 3이고, n<sub>1</sub>이 2 이상일 경우 2 이상의 L<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이하고,

[0013] L<sub>2</sub>는 1자리(monodentate) 리간드, 2자리(bidentate) 리간드, 3자리(tridentate) 리간드 또는 4자리(tetradentate) 리간드이고,

[0014] n<sub>2</sub>는 0, 1, 2, 3 또는 4이고, n<sub>2</sub>가 2 이상일 경우 2 이상의 L<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이하고,

[0015] L<sub>1</sub>과 L<sub>2</sub>는 서로 상이하고,

[0016] <화학식 2>



[0017]

[0018]

[0019]

[0020]

[0021]

[0022]

[0023]

[0024]

[0025]

[0026]

[0027]

[0028]

[0029]

[0030]

상기 화학식 2 중,

X<sub>1</sub>은 C, N, Si 또는 P이고,

X<sub>21</sub>은 C 또는 N이고,

고리 CY<sub>1</sub> 및 고리 CY<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹이고,

X<sub>2</sub> 및 X<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, O, S, Se 또는 C(R<sub>2</sub>)이고, X<sub>2</sub> 및 X<sub>3</sub> 중 하나는 O, S 또는 Se이고,

X<sub>4</sub>는 N 또는 C(R<sub>4</sub>)이고,

X<sub>5</sub>는 N 또는 C(R<sub>5</sub>)이고,

R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub> 및 R<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF<sub>5</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 또는 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)이고,

a<sub>1</sub> 및 a<sub>21</sub>은 서로 독립적으로, 0 내지 20 중에서 선택된 정수이고,

고리 CY<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 서로 결합되지 않고, R<sub>1</sub>과 R<sub>2</sub>는 서로 결합되지 않고,

L<sub>11</sub>은 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹이고,

b<sub>11</sub>은 0 내지 10의 중에서 선택된 정수이고, b<sub>11</sub>이 0일 경우 \*-(L<sub>11</sub>)<sub>b11</sub>-\*로 표시된 그룹은 단일 결합이고, b<sub>11</sub>이 2 이상일 경우 2 이상의 L<sub>11</sub>은 서로 동일하거나 상이하고,

서로 이웃한 복수의 R<sub>21</sub> 중 2개는 선택적으로, 서로 연결되어, 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카

보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹을 형성할 수 있고,

- [0031] R<sub>10a</sub>에 대한 설명은 상기 R<sub>21</sub>에 대한 설명을 참조하고,
- [0032] \* 및 \*'은 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이고,
- [0033] 상기 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기는,
- [0034] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0035] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>), -B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0036] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0037] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>), -B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>) 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0038] -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>), -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>) 또는 -P(=O)(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>); 또는
- [0039] 이의 임의의 조합;
- [0040] 이고,
- [0041] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>19</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>29</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>39</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.
- [0042] 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 발광층을 포함한 유

기층;을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물을 1종 이상을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0043] 상기 유기층 중 발광층에 포함된 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 할 수 있다.

[0044] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

**발명의 효과**

[0045] 상기 유기금속 화합물은 높은 방사 감쇠율(radiative decay rate)을 갖는 바, 상기 유기금속 화합물을 채용한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자는 향상된, 구동 전압, 외부 양자 발광 효율, 롤-오프비 및 수명 특성을 가질 수 있다. 또한, 상기 유기금속 화합물은 우수한 인광 발광 특성을 가지므로, 이를 이용하면, 높은 진단 효율을 갖는 진단용 조성물을 제공할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0046] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0047] 상기 유기금속 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0048] <화학식 1>



[0050] 상기 화학식 1 중 M은 전이 금속일 수 있다.

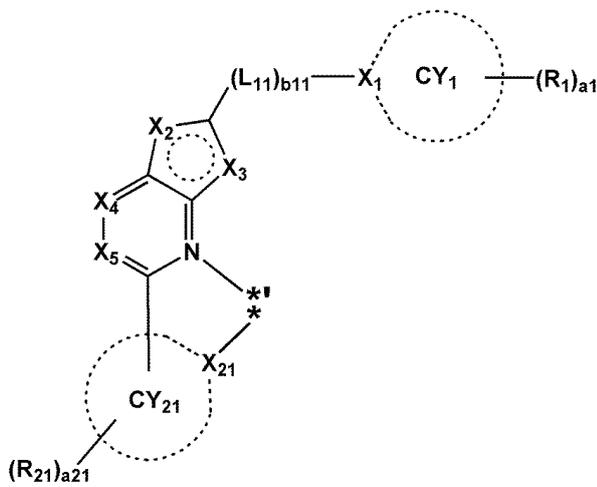
[0051] 예를 들어, 상기 M은 1주기 전이 금속, 2주기 전이 금속 및 3주기 전이 금속 중에서 선택될 수 있다.

[0052] 또 다른 예로서, 상기 M은 이리듐(Ir), 백금(Pt), 오스뮴(Os), 티탄(Ti), 지르코늄(Zr), hafnium(Hf), 유로퓸(Eu), 테르븀(Tb), 툴륨(Tm) 또는 로듐(Rh)일 수 있다.

[0053] 일 구현예에 따르면, 상기 M은 Ir, Pt, Os 또는 Rh일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0054] 상기 화학식 1 중  $L_1$ 은 하기 화학식 2로 표시된 리간드이고, 상기 화학식 1 중  $n1$ 은 상기 화학식 1 중  $L_1$ 의 개수를 나타낸 것으로서, 1, 2 또는 3일 수 있다. 상기  $n1$ 이 2 이상일 경우 2 이상의  $L_1$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0055] <화학식 2>



[0056] 상기 화학식 2에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

[0058] 예를 들어, 상기  $n1$ 은 1 또는 2일 수 있다.

[0059] 상기 화학식 1 중  $L_2$ 는 1자리(monodentate) 리간드, 2자리(bidentate) 리간드, 3자리(tridentate) 리간드 또는

4자리(tetradentate) 리간드이고, 상기 화학식 1 중  $n_2$ 는  $L_2$ 의 개수를 나타낸 것으로서, 0, 1, 2, 3 또는 4일 수 있다. 상기  $n_2$ 가 2 이상일 경우 2 이상의  $L_2$ 는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기  $L_2$ 에 대한 설명은 후술하는 바를 참조한다.

- [0060] 예를 들어, 상기 화학식 1 중  $n_2$ 는 1 또는 2일 수 있다.
- [0061] 상기 화학식 1 중  $L_1$ 과  $L_2$ 는 서로 상이하다.
- [0062] 일 구현예에 따르면, 상기 M은 Ir 또는 Os이고,  $n_1 + n_2$ 는 3 또는 4이거나; 또는 상기 M은 Pt이고,  $n_1 + n_2$ 는 2일 수 있다.
- [0063] 상기 화학식 2 중  $X_1$ 은 C, N, Si 또는 P이고,  $X_{21}$ 은 C 또는 N일 수 있다.
- [0064] 예를 들어, 상기 화학식 2 중  $X_{21}$ 은 C일 수 있다.
- [0065] 상기 화학식 2 중 고리  $CY_1$  및 고리  $CY_{21}$ 은 서로 독립적으로,  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는  $C_1$ - $C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹일 수 있다.
- [0066] 예를 들어, 상기 고리  $CY_1$  및 고리  $CY_{21}$ 은, 서로 독립적으로, i) 제1고리, ii) 제2고리, iii) 2 이상의 제1고리가 서로 축합된 축합환, iv) 2 이상의 제2고리가 서로 축합된 축합환 또는 v) 1 이상의 제1고리와 1 이상의 제2고리가 서로 축합된 축합환이고,
- [0067] 상기 제1고리는 시클로펜탄 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 인텐 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인돌 그룹, 벤조실롤 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 이속사디아졸 그룹, 옥사트리아졸 그룹, 이속사트리아졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 이소티아디아졸 그룹, 티아트리아졸 그룹, 이소티아트리아졸 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 아자실롤 그룹, 다이아자실롤 그룹 또는 트리아자실롤 그룹이고,
- [0068] 상기 제2고리는 아다만탄(admantane) 그룹, 노르보르난(norbornane) 그룹, 노르보르넨 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헥센 그룹, 벤젠 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹 또는 트리아진 그룹일 수 있다.
- [0069] 일 구현예에 따르면, 상기 고리  $CY_1$  및 고리  $CY_{21}$ 은, 서로 독립적으로, 시클로펜텐 그룹, 시클로헥센 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 1,2,3,4-테트라히드로나프탈렌(1,2,3,4-tetrahydronaphthalene) 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인텐 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저몰 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노헨 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노헨 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인텐 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저몰 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노헨 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저몰 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노헨 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹, 벤조티아디아졸 그룹, 5,6,7,8-테트라히드로이소퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroisoquinoline) 그룹 또는 5,6,7,8-테트라히드로퀴놀린(5,6,7,8-tetrahydroquinoline) 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0070] 다른 구현예에 따르면, 상기 고리  $CY_1$ 은, 시클로펜탄 그룹, 시클로헥산 그룹, 시클로헵탄 그룹, 시클로옥탄 그룹, 아다만탄 그룹, 노르보르난 그룹, 노르보르넨 그룹, 시클로펜텐 그룹, 시클로헥센 그룹, 시클로헵텐 그룹, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 플루오렌 그룹, 페난트렌 그룹, 안트라센 그룹, 플루오란텐 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 피롤 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 이미다졸 그룹, 피라졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이속사졸 그룹, 피리딘 그룹, 피라진 그룹, 피리미딘 그룹, 피리다진 그

룹, 이소인돌 그룹, 인돌 그룹, 인다졸 그룹, 푸린 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 벤조퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 시놀린 그룹, 카바졸 그룹, 페난트롤린 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 이소벤조티아졸 그룹, 벤즈옥사졸 그룹, 이소벤즈옥사질 그룹, 트리아졸 그룹, 테트라졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 트리아진 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조실롤 그룹, 벤조카바졸 그룹, 디벤조카바졸 그룹, 이미다조피리딘 그룹 또는 이미다조피리미딘 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0071] 상기 화학식 2 중  $X_2$  및  $X_3$ 는 서로 독립적으로, O, S, Se 또는  $C(R_2)$ 이되,  $X_2$  및  $X_3$  중 하나는 O, S 또는 Se일 수 있다.

[0072] 예를 들어, 상기 화학식 2 중 i)  $X_2$ 는 O, S 또는 Se이고,  $X_3$ 는  $C(R_2)$ 이거나; 또는 ii)  $X_2$ 는  $C(R_2)$ 이고,  $X_3$ 는 O, S 또는 Se일 수 있다.

[0073] 상기 화학식 2 중  $X_4$ 는 N 또는  $C(R_4)$ 이고,  $X_5$ 는 N 또는  $C(R_5)$ 일 수 있다.

[0074] 예를 들어, 상기  $X_4$ 는  $C(R_4)$ 이고,  $X_5$ 는  $C(R_5)$ 일 수 있다.

[0075] 상기 화학식 2 중 상기  $R_1, R_2, R_4, R_5, R_{21}$  및  $R_{10a}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -SF<sub>5</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 치환 또는 비치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>), -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>), -B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>) 또는 -P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)일 수 있다. 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

[0076] 예를 들어, 상기  $R_1, R_2, R_4, R_5, R_{21}$  및  $R_{10a}$ 는 서로 독립적으로,

[0077] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, -SF<sub>5</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0078] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 노르보네닐기(norborneny1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]penty1), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexy1), 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]hepty1), 비시클로[2.2.2]옥틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기;

[0079] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantany1), 노르보나닐기(norbornany1), 노르보네닐기(norborneny1), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 시클로옥테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]penty1), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexy1), 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]hepty1), 비시클로[2.2.2]옥틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기,

시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 및  $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$  중에서 선택된 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헥틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 시클로옥세테닐기, 비시클로[1.1.1]펜틸기(bicyclo[1.1.1]pentyl), 비시클로[2.1.1]헥실기(bicyclo[2.1.1]hexyl), 비시클로[2.2.1]헵틸기(bicyclo[2.2.1]heptyl), 비시클로[2.2.2]옥틸기, 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴놀살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기; 또는

[0080]  $-N(Q_1)(Q_2)$ ,  $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ ,  $-B(Q_6)(Q_7)$ ,  $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$  또는  $-P(Q_8)(Q_9)$ ;

[0081] 이고,

[0082]  $Q_1$  내지  $Q_9$  및  $Q_{33}$  내지  $Q_{35}$ 는 서로 독립적으로,

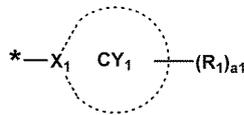
[0083]  $-CH_3$ ,  $-CD_3$ ,  $-CD_2H$ ,  $-CDH_2$ ,  $-CH_2CH_3$ ,  $-CH_2CD_3$ ,  $-CH_2CD_2H$ ,  $-CH_2CDH_2$ ,  $-CHDCH_3$ ,  $-CHDCD_2H$ ,  $-CHDCDH_2$ ,  $-CHDCD_3$ ,  $-CD_2CD_3$ ,  $-CD_2CD_2H$  또는  $-CD_2CDH_2$ ;

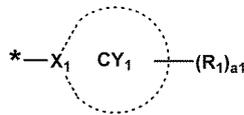
[0084] 중수소,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기 및 페닐기 중에서 선택된 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, 페닐기 또는 나프틸기;

[0085] 일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0086] 상기 화학식 2 중  $a_1$  및  $a_{21}$ 은 각각  $R_1$  및  $R_{21}$ 의 개수를 나타낸 것으로서, 서로 독립적으로, 0 내지 20 중에서 선택된 정수(예를 들면, 0 내지 10 중에서 선택된 정수, 또는 0 내지 5 중에서 선택된 정수)일 수 있다. 상기  $a_1$ 이 2 이상일 경우 2 이상의  $R_1$ 은 서로 동일하거나 상이하고, 상기  $a_{21}$ 이 2 이상일 경우 2 이상의  $R_{21}$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0087] 상기 화학식 2 중 고리  $CY_1$ 과  $R_2$ 는 서로 결합되지 않고,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 서로 결합되지 않는다.



[0088] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2의 로 표시된 그룹은  $a_1$ 개의  $R_1$ 으로 치환 또는 비치환된,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기,  $C_6$ - $C_{60}$ 아릴기,  $C_1$ - $C_{60}$ 헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이고,

[0089] 상기 화학식 2의  $R_1$  및  $R_2$ 는 서로 독립적으로,

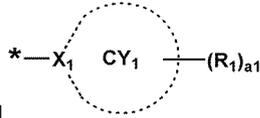
[0090] 수소, 중수소,  $-F$ ,  $-Cl$ ,  $-Br$ ,  $-I$ , 시아노기 또는  $-SF_5$ ; 또는

[0091] 중수소,  $-F$ ,  $-Cl$ ,  $-Br$ ,  $-I$ ,  $-CD_3$ ,  $-CD_2H$ ,  $-CDH_2$ ,  $-CF_3$ ,  $-CF_2H$ ,  $-CFH_2$ , 시아노기,  $C_1$ - $C_{20}$ 알킬기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헥테닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환 또는 비치환된,  $C_1$ - $C_{60}$ 알킬기,  $C_1$ - $C_{60}$ 알콕시기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알킬기,  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알킬기,  $C_3$ - $C_{10}$ 시클로알케닐기 또는  $C_1$ - $C_{10}$ 헤테로시클로알케닐기;

[0092] 이고,

[0093] 상기 a1은 0 내지 10의 정수 중에서 선택될 수 있다.

[0094] 상기 a1, R<sub>1</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.



[0095] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2의 로 표시된 그룹은 a1개의 R<sub>1</sub>으로 치환 또는 비치환된, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트라세닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 피롤일기, 티오펜일기, 퓨라닐기, 이미다졸일기, 피라졸일기, 티아졸일기, 이소티아졸일기, 옥사졸일기, 이속사졸일기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 피리다지닐기, 이소인돌일기, 인돌일기, 인다졸일기, 푸리닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조퀴놀리닐기, 퀴녹살리닐기, 퀴나졸리닐기, 시놀리닐기, 카바졸일기, 페난트롤리닐기, 벤조이미다졸일기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 이소벤조티아졸일기, 벤조옥사졸일기, 이소벤조옥사졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 트리아지닐기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜일기, 벤조카바졸일기, 디벤조카바졸일기, 이미다조피리디닐기 또는 이미다조피리미디닐기이고,

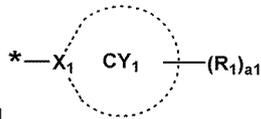
[0096] 상기 화학식 2의 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 서로 독립적으로,

[0097] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 시아노기 또는 -SF<sub>3</sub>; 또는

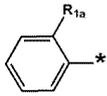
[0098] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 시아노기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 시클로헵틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기, 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 피리디닐기 및 피리미디닐기 중 적어도 하나로 치환 또는 비치환된, 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-부틸기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, sec-펜틸기, tert-펜틸기, n-헥실기, 이소헥실기, sec-헥실기, tert-헥실기, n-헵틸기, 이소헵틸기, sec-헵틸기, tert-헵틸기, n-옥틸기, 이소옥틸기, sec-옥틸기, tert-옥틸기, n-노네닐기, 이소노네닐기, sec-노네닐기, tert-노네닐기, n-데카닐기, 이소데카닐기, sec-데카닐기, tert-데카닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시, 시클로헵틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기, 아다만타닐기(adamantanyl), 노르보나닐기(norbornanyl), 노르보네닐기(norbornenyl), 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기 또는 시클로헵테닐기;

[0099] 이고,

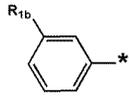
[0100] 상기 a1은 0 내지 5의 정수 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



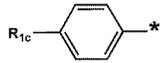
[0101] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 2의 로 표시된 그룹은 하기 화학식 10-13(1) 내지 10-13(18) 및 10-13 중 하나로 표시된 그룹일 수 있다:



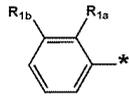
10-13(1)



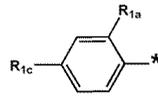
10-13(2)



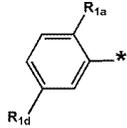
10-13(3)



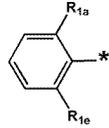
10-13(4)



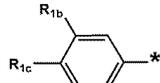
10-13(5)



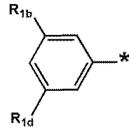
10-13(6)



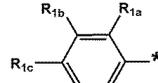
10-13(7)



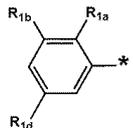
10-13(8)



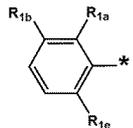
10-13(9)



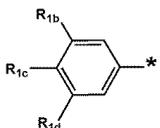
10-13(10)



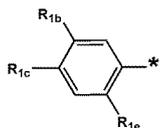
10-13(11)



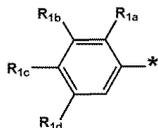
10-13(12)



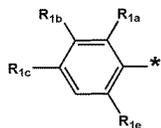
10-13(13)



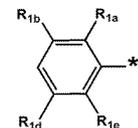
10-13(14)



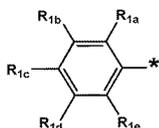
10-13(15)



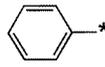
10-13(16)



10-13(17)



10-13(18)



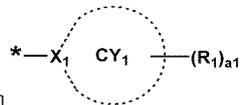
10-13

[0102]

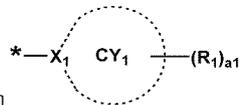
[0103]

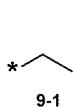
[0104]

상기 화학식 10-13(1) 내지 10-13(18) 중 R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1e</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>1</sub>에 대한 설명을 참조 하되, R<sub>1a</sub> 내지 R<sub>1e</sub>은 수소가 아니고, \*는 이웃한 탄소 원자와의 결합 사이트이다.



[0105]

예를 들어, 상기 화학식 2 중, 상기  로 표시된 그룹은 하기 화학식 10-13 내지 10-240으로 표시된 그룹 중에서 선택되고, 상기 R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>21</sub> 및 R<sub>10a</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, 시아노기, 니트로기, -SF<sub>5</sub>, -CH<sub>3</sub>, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 하기 화학식 9-1 내지 9-19로 표시되는 그룹, 하기 화학식 10-1 내지 10-240으로 표시되는 그룹 및 -Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>) (상기 Q<sub>3</sub> 내지 Q<sub>5</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조함) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



9-1



9-2



9-3



9-4



9-5



9-6



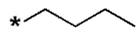
9-7



9-8



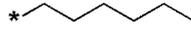
9-9



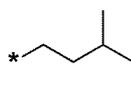
9-10



9-11



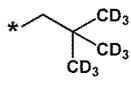
9-12



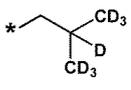
9-13



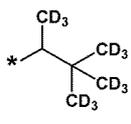
9-14



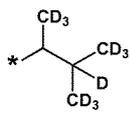
9-15



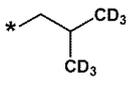
9-16



9-17

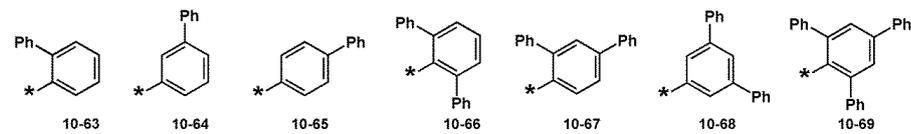
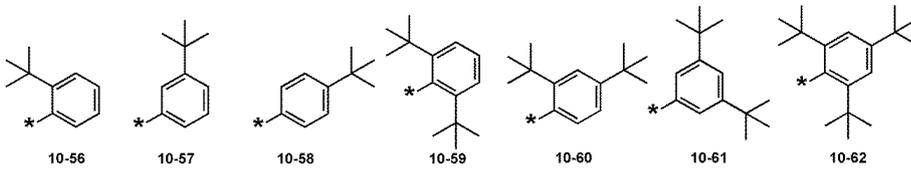
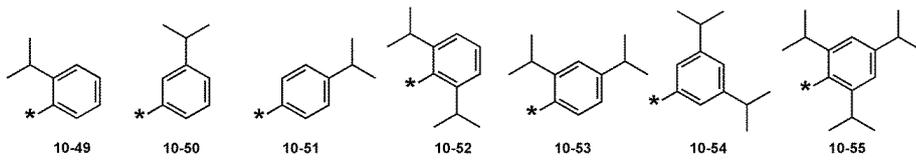
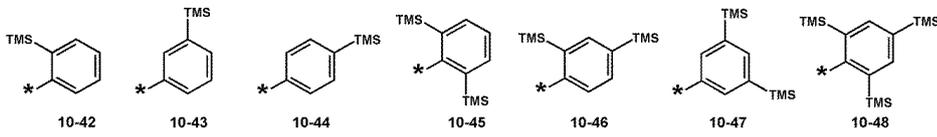
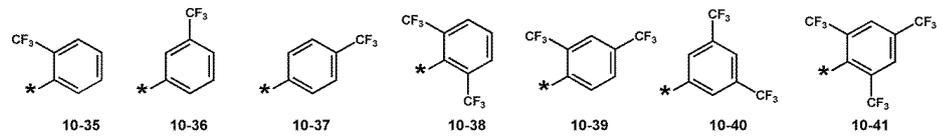
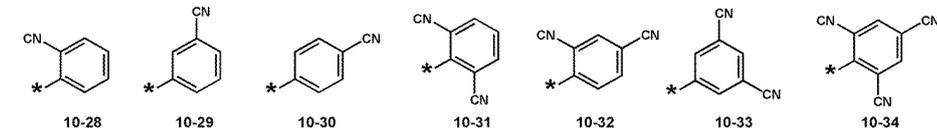
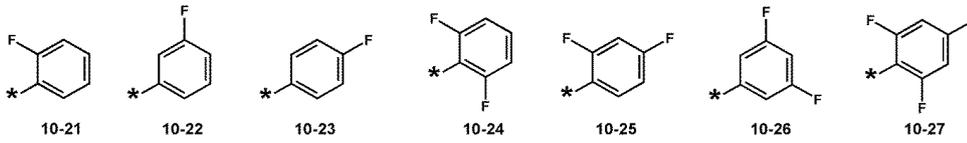
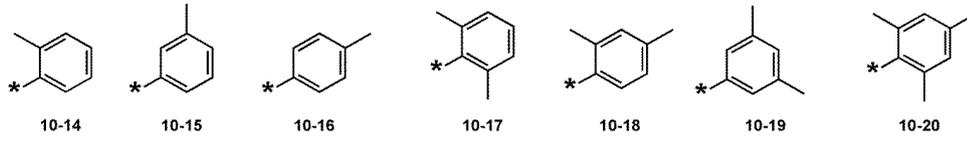
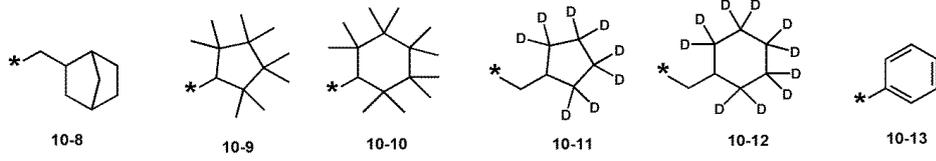
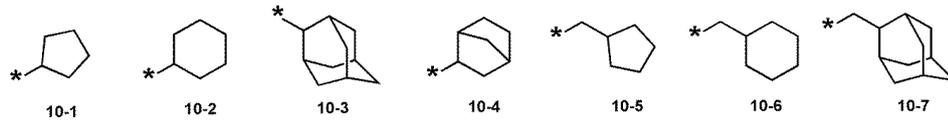


9-18



9-19

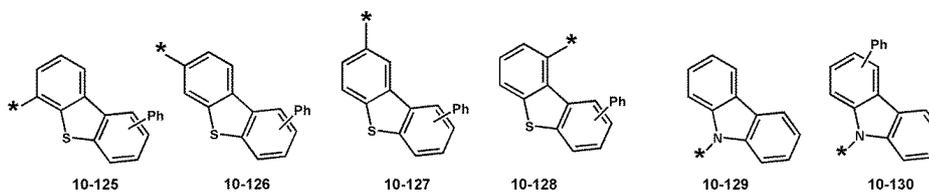
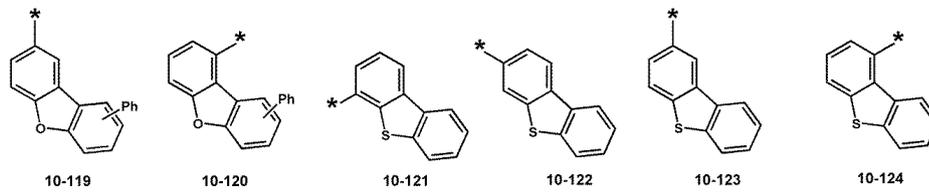
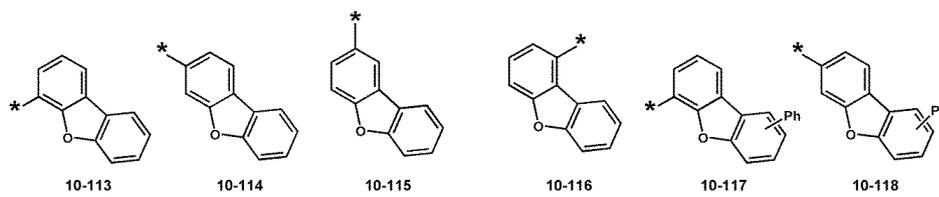
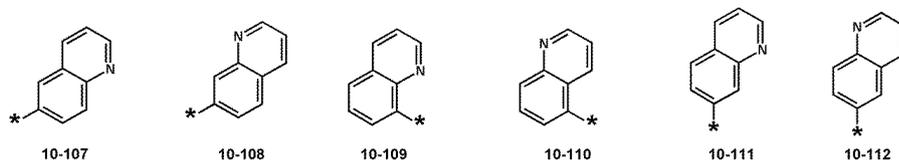
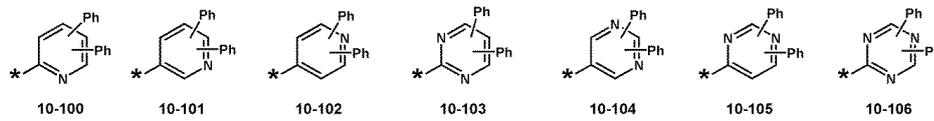
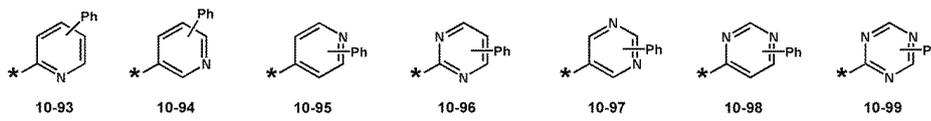
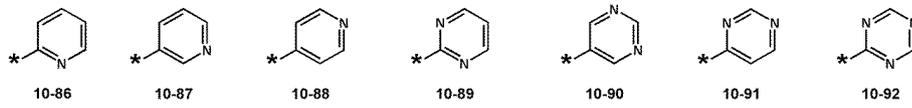
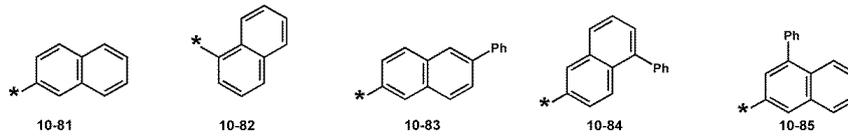
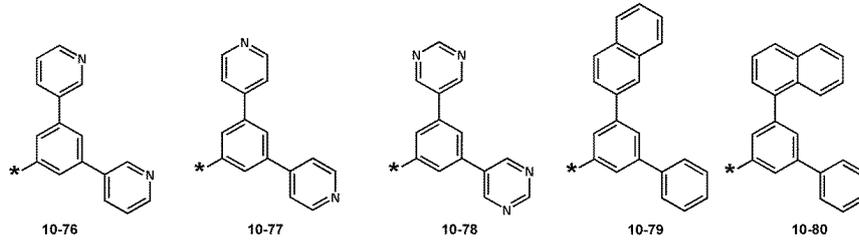
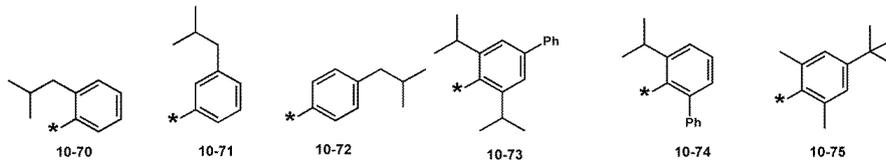
[0106]



[0107]

[0108]

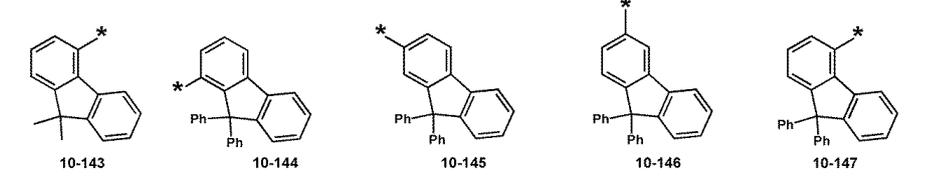
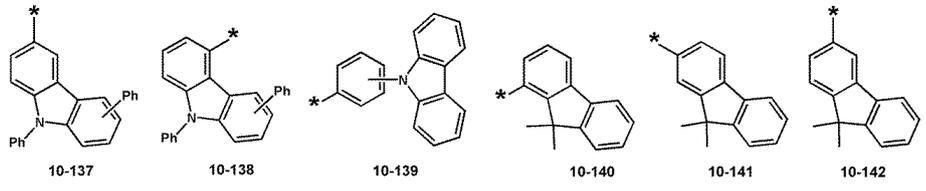
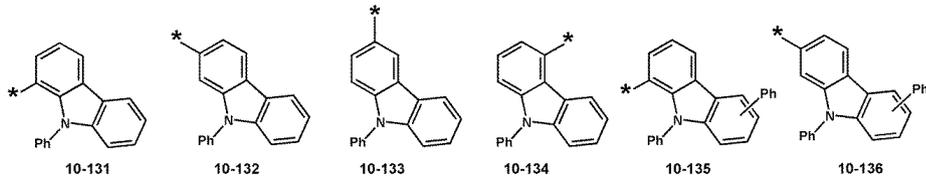
[0109]



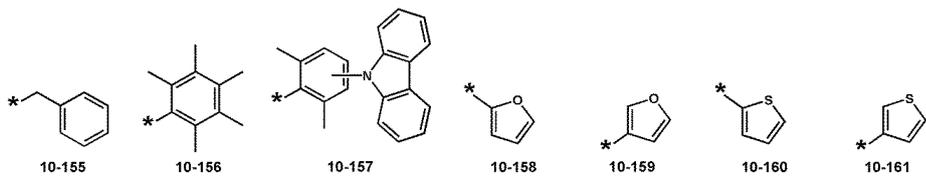
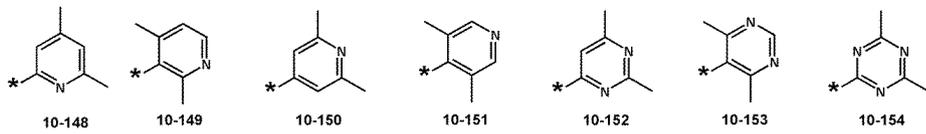
[0110]

[0111]

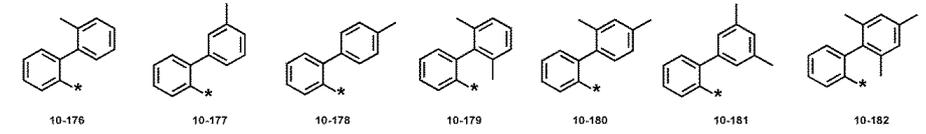
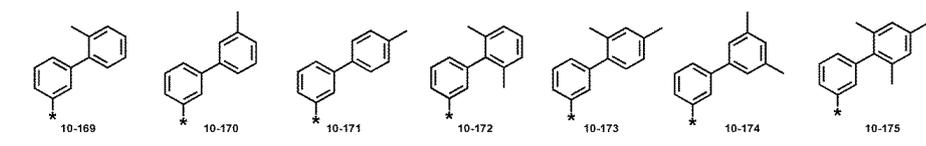
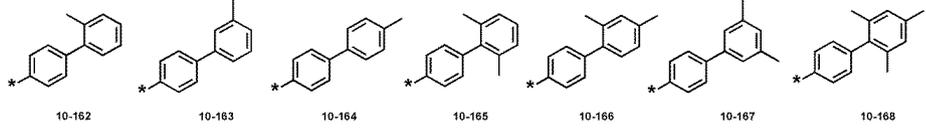
[0112]



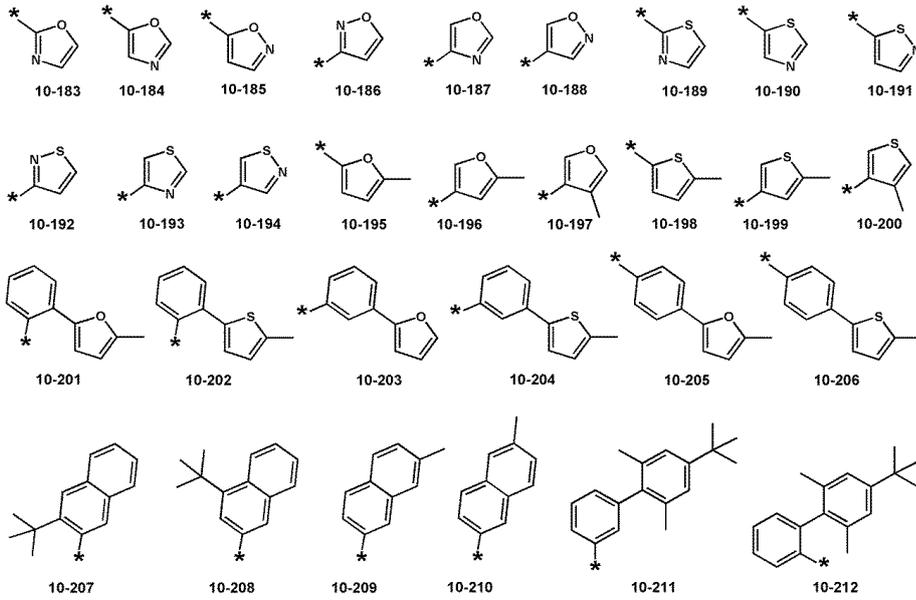
[0113]



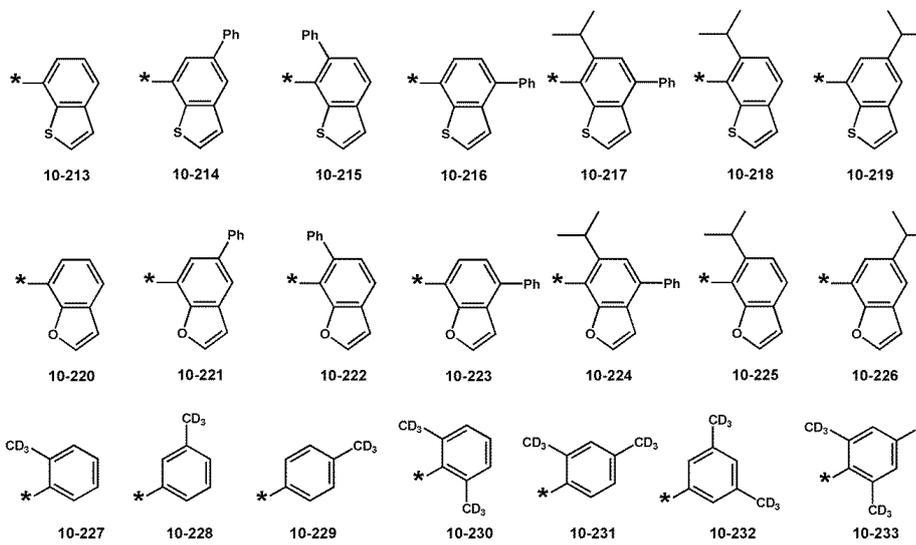
[0114]



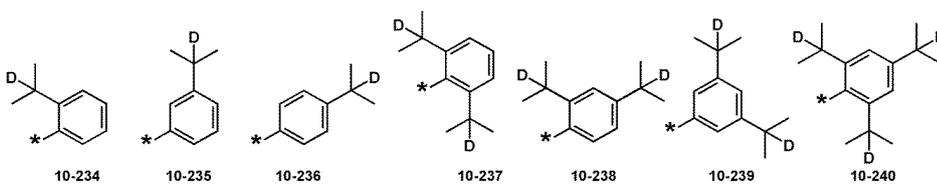
[0115]



[0116]



[0117]



[0118]

[0119] 상기 화학식 9-1 내지 9-19 및 10-1 내지 10-240 중 \*는 이웃한 원자와의 결합 사이트이고, Ph는 페닐기이고, TMS는 트리메틸실릴기이다.

[0120] 상기 화학식 2 중 L<sub>11</sub>은 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹, 또는 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹일 수 있다. 상기 R<sub>10a</sub>에 대한 설명은 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

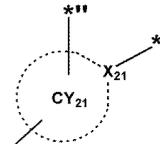
[0121] 예를 들어, 상기 L<sub>11</sub>은, 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹, 나프탈렌 그룹, 안트라센 그룹, 페난트렌 그룹, 트리페닐렌 그룹, 파이렌 그룹, 크라이센 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 티오펜 그룹, 퓨란 그룹, 인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저몰 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저몰 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저몰 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀

레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹, 피리딘 그룹, 피리미딘 그룹, 피라진 그룹, 피리다진 그룹, 트리아진 그룹, 퀴놀린 그룹, 이소퀴놀린 그룹, 퀴녹살린 그룹, 퀴나졸린 그룹, 페난트롤린 그룹, 피롤 그룹, 피라졸 그룹, 이미다졸 그룹, 트리아졸 그룹, 옥사졸 그룹, 이소옥사졸 그룹, 티아졸 그룹, 이소티아졸 그룹, 옥사디아졸 그룹, 티아디아졸 그룹, 벤조피라졸 그룹, 벤조이미다졸 그룹, 벤조옥사졸 그룹, 벤조티아졸 그룹, 벤조옥사디아졸 그룹 또는 벤조티아디아졸 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

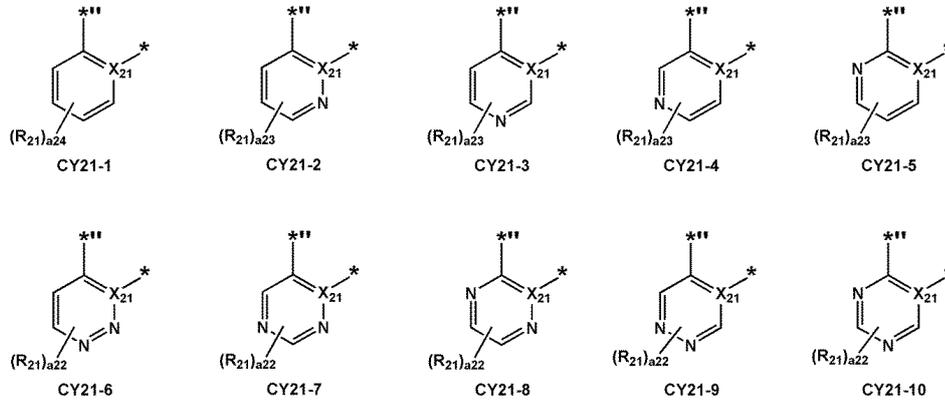
[0122] 상기 화학식 2 중 b11은 L<sub>11</sub>의 개수를 나타낸 것으로서, 0 내지 10의 중에서 선택된 정수이고, b11이 0일 경우  $*(L_{11})_{b11}-*$ 으로 표시된 그룹은 단일 결합이고, b11이 2 이상일 경우 2 이상의 L<sub>11</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 예를 들어, 상기 b11은 0, 1, 2 또는 3일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0123] 상기 화학식 2 중 서로 이웃한 복수의 R<sub>21</sub> 중 2개는 선택적으로, 서로 연결되어, 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹 또는 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹(예를 들면, 적어도 하나의 R<sub>10a</sub>로 치환 또는 비치환된, 벤젠 그룹, 시클로펜탄 그룹, 시클로펜타디엔 그룹, 퓨란 그룹, 티오펜 그룹, 피롤 그룹, 실롤 그룹, 인덴 그룹, 벤조퓨란 그룹, 벤조티오펜 그룹, 인돌 그룹 또는 벤조실롤 그룹)을 형성할 수 있으며, 상기 R<sub>10a</sub>에 대한 설명은 본 명세서 중 R<sub>21</sub>에 대한 설명을 참조한다. 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹 및 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조한다.

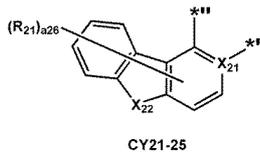
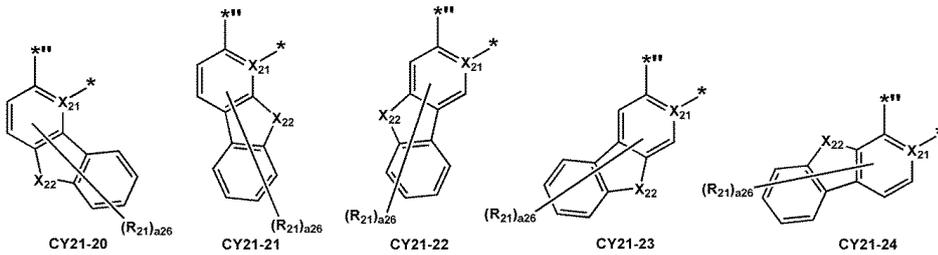
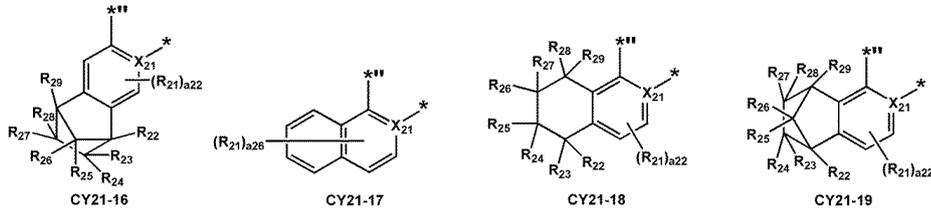
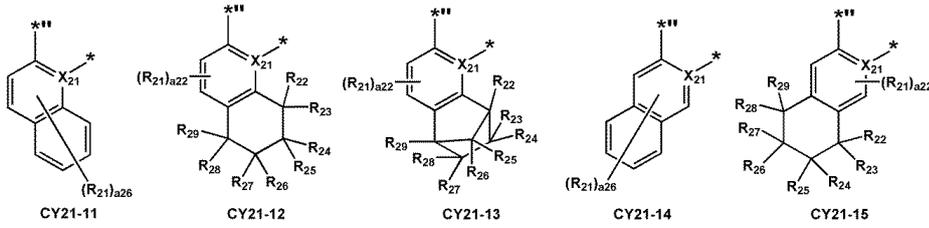
[0124] 상기 화학식 2 중 \* 및 \*'은 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.



[0125] 한편, 상기 화학식 2 중 (R<sub>21</sub>)<sub>a21</sub> 로 표시된 그룹이 하기 화학식 CY21-1 내지 CY21-25 중 하나로 표시된 그룹일 수 있다:



[0126]



[0127]

[0128]

[0129]

[0130]

[0131]

[0132]

[0133]

[0134]

[0135]

[0136]

[0137]

[0138]

상기 화학식 CY21-1 내지 CY21-25 중,

X<sub>21</sub> 및 R<sub>21</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

X<sub>22</sub>는 C(R<sub>22</sub>)(R<sub>23</sub>), N(R<sub>22</sub>), O, S 또는 Si(R<sub>22</sub>)(R<sub>23</sub>)이고,

R<sub>22</sub> 내지 R<sub>29</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>21</sub>에 대한 설명을 참조하고,

a<sub>26</sub>은 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

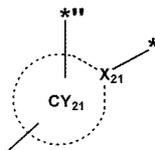
a<sub>24</sub>는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>23</sub>은 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

a<sub>22</sub>는 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

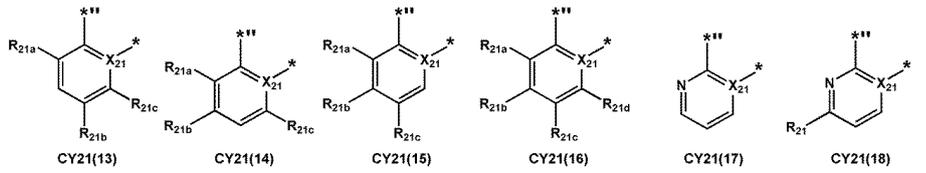
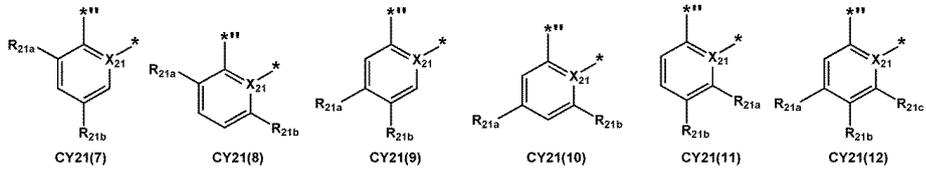
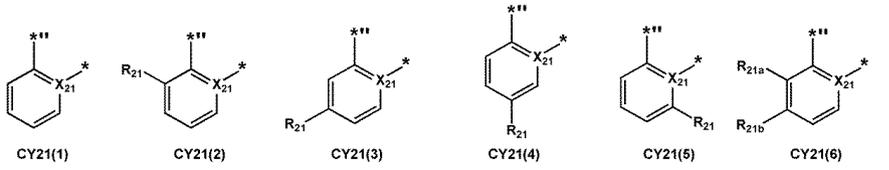
\*"은 화학식 2 중 이웃한 6원환의 탄소 원자와의 결합 사이트이고,

\*는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

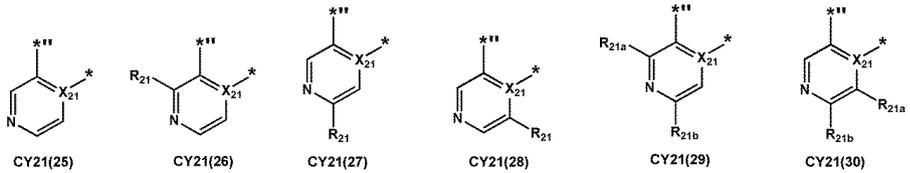
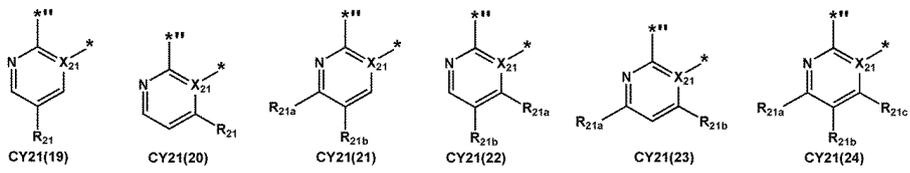


[0139]

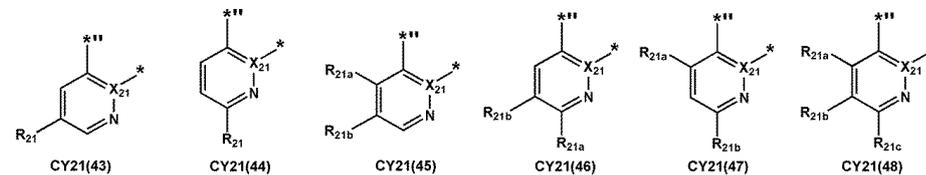
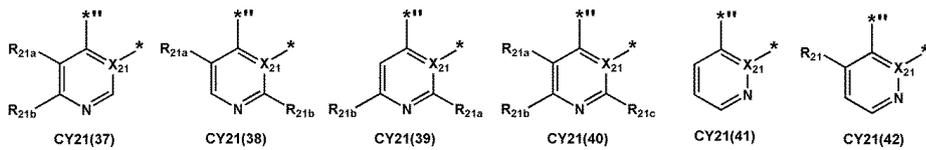
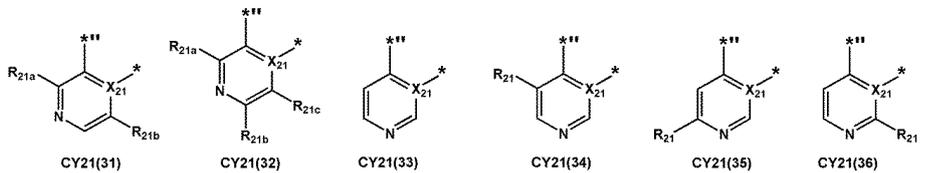
또 다른 예로서, 상기 화학식 2 중 (R<sub>21</sub>)<sub>a21</sub> 로 표시된 그룹은 하기 화학식 CY21(1) 내지 CY21(56) 중 하나로 표시된 그룹 또는 상기 화학식 CY21-20 내지 CY21-26 중 하나로 표시된 그룹일 수 있다:



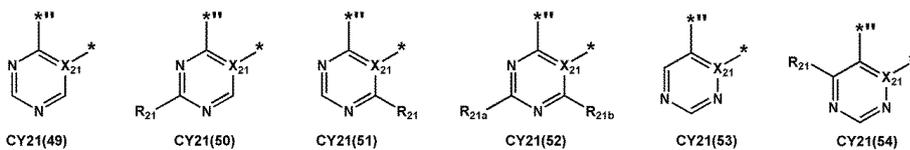
[0140]

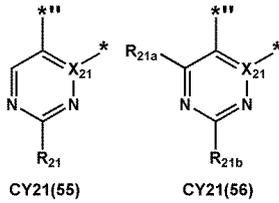


[0141]



[0142]





[0143]

[0144]

[0145]

[0146]

[0147]

[0148]

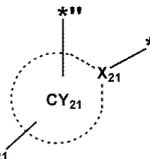
상기 화학식 CY21(1) 내지 CY21(56) 중,

X<sub>21</sub> 및 R<sub>21</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

R<sub>21a</sub> 내지 R<sub>21d</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>21</sub>에 대한 설명을 참조하되, R<sub>21</sub> 및 R<sub>21a</sub> 내지 R<sub>21d</sub>는 수소가 아니고,

"\*"은 화학식 2 중 이웃한 6원환의 탄소 원자와의 결합 사이트이고,

\*는 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.



[0149]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 2 중 (R<sub>21</sub>)<sub>a21</sub> 로 표시된 그룹은 상기 화학식 CY21(1), CY21(3) 및 CY21(10) 중 하나로 표시된 그룹 또는 상기 화학식 CY21-20 내지 CY21-26 중 하나로 표시된 그룹일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 화학식 CY21(10) 중 R<sub>21a</sub> 및 R<sub>21b</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 또 다른 예로서, 상기 화학식 CY21(10) 중 R<sub>21a</sub> 및 R<sub>21b</sub>는 서로 상이하고, R<sub>21a</sub>에 포함된 탄소수가 R<sub>21b</sub>에 포함된 탄소수보다 클 수 있다.

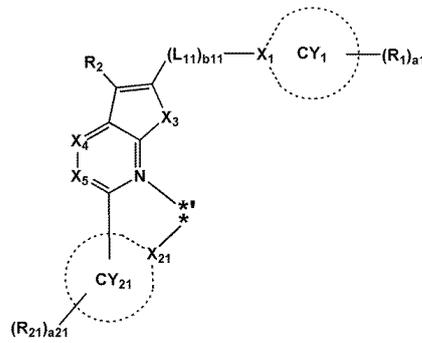
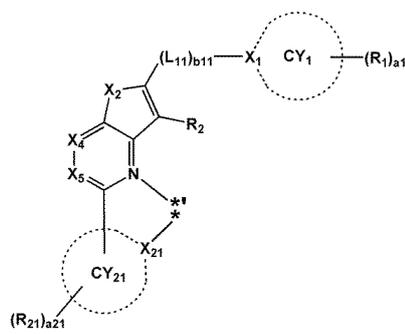
[0150]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1의 L<sub>1</sub>의 화학식 2A 또는 2B로 표시된 리간드일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

[0151]

<화학식 2A>

<화학식 2B>



[0152]

[0153]

상기 화학식 2A 및 2B 중 X<sub>1</sub>, X<sub>21</sub>, 고리 CY<sub>1</sub>, 고리 CY<sub>21</sub>, X<sub>4</sub>, X<sub>5</sub>, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, a<sub>1</sub>, a<sub>21</sub>, L<sub>11</sub>, b<sub>11</sub>, \* 및 \*'에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고, X<sub>2</sub> 및 X<sub>3</sub>는 O, S 또는 Se이다.

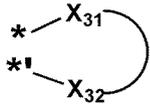
[0154]

상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는, O, S, N, C, P, Si 또는 As를 통하여 상기 화학식 1의 M과 각각 결합된 2자리 리간드 중에서 선택될 수 있다.

[0155]

일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는, 하기 화학식 3으로 표시된 2자리 리간드 중에서 선택될 수 있다:

[0156] <화학식 3>



[0157]

[0158] 상기 화학식 3 중,

[0159]  $X_{31}$  및  $X_{32}$ 는 서로 독립적으로, O, S, N, C, P, Si 또는 As이고,

[0160]  는  $X_{31}$ 과  $X_{32}$ 를 서로 연결하는 임의의 원자단을 나타내고,

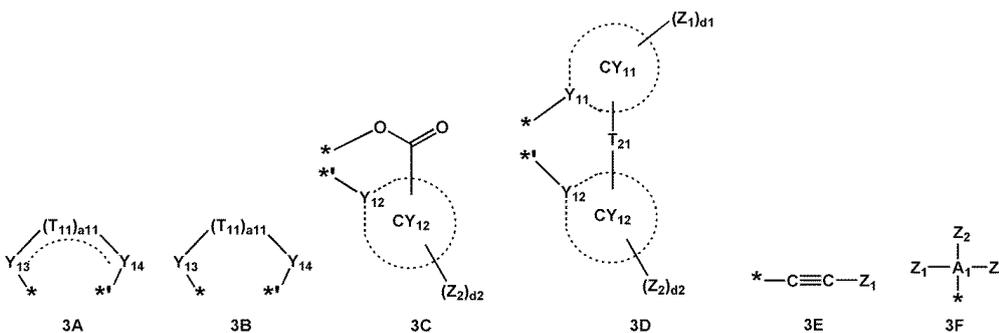
[0161] \* 및 \*'은 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

[0162] 예를 들어, 상기 화학식 3 중, i)  $X_{31}$  및  $X_{32}$ 는 O이거나; ii)  $X_{31}$ 은 O이고,  $X_{32}$ 는 N이거나, 또는 iii)  $X_{31}$ 은 N이고,  $X_{32}$ 는 C일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0163] 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $L_2$ 는 1자리 리간드, 예를 들면,  $I^-$ ,  $Br^-$ ,  $Cl^-$ , 설��파이드(sulfide), 나이트레이트(nitrate), 아자이드(azide), 히드록사이드(hydroxide), 시아네이트(cyanate), 이소시아네이트(isocyanate), 티오시아네이트(thiocyanate), 물, 아세토니트릴(acetonitrile), 피리딘(pyridine), 암모니아(ammonia), 일산화탄소,  $P(Ph)_3$ ,  $P(Ph)_2CH_3$ ,  $PPh(CH_3)_2$  및  $P(CH_3)_3$  중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0164] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $L_2$ 는 2자리 리간드, 예를 들면, 옥살레이트(oxalate), 아세틸아세토네이트(acetylacetonate), 피콜린산(picolinic acid), 1,2-비스(디페닐포스피노)에텐(1,2-bis(diphenylphosphino)ethane), 1,1-비스(디페닐포스피노)메탄(1,1-bis(diphenylphosphino)methane), 글리시네이트(glycinate) 및 에틸렌디아민(ethylenediamine) 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0165] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 중  $L_2$ 는 하기 화학식 3A 내지 3F로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있다:



[0166]

[0167] 상기 화학식 3A 내지 3F 중,

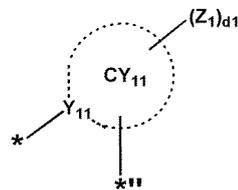
[0168]  $Y_{13}$ 은 O, N,  $N(Z_1)$ ,  $P(Z_1)(Z_2)$  또는  $As(Z_1)(Z_2)$ 이고,

[0169]  $Y_{14}$ 은 O, N,  $N(Z_3)$ ,  $P(Z_3)(Z_4)$  또는  $As(Z_3)(Z_4)$ 이고,

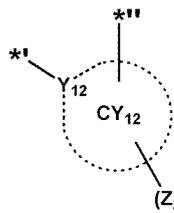
[0170]  $T_{11}$ 은 서로 독립적으로, 단일 결합, 이중 결합,  $*-C(Z_{11})(Z_{12})-*'$ ,  $*-C(Z_{11})=C(Z_{12})-*'$ ,  $*=C(Z_{11})-*'$ ,  $*-C(Z_{11})=*'$ ,  $*=C(Z_{11})-C(Z_{12})=C(Z_{13})-*'$ ,  $*-C(Z_{11})=C(Z_{12})-C(Z_{13})=*'$ ,  $*-N(Z_{11})-*'$ , 또는 적어도 하나의  $Z_{11}$ 로 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{30}$ 카보시클릭 그룹이고,

[0171] a11은 1 내지 10 중에서 선택된 정수이고,

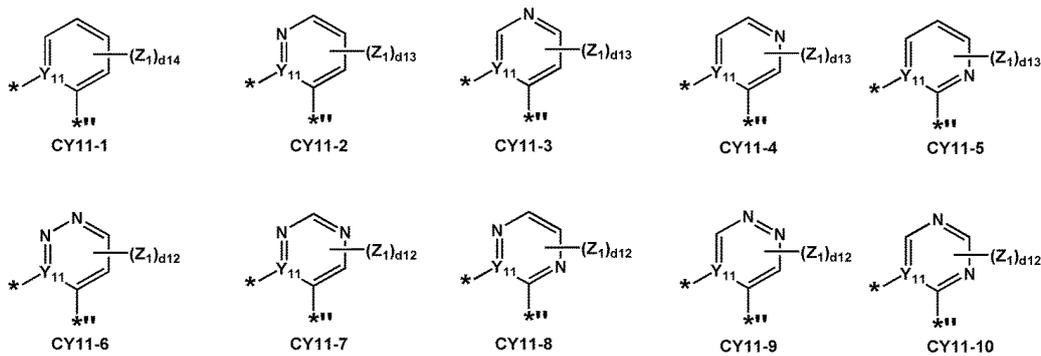
- [0172]  $Y_{11}$  및  $Y_{12}$ 는 서로 독립적으로, C 또는 N이고,
- [0173]  $T_{21}$ 은 단일 결합, 이중 결합, 0, S, C( $Z_{11}$ )( $Z_{12}$ ), Si( $Z_{11}$ )( $Z_{12}$ ) 또는 N( $Z_{11}$ )이고,
- [0174] 고리  $CY_{11}$  및 고리  $CY_{12}$ 는 서로 독립적으로,  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 또는  $C_1$ - $C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹이고,
- [0175]  $A_1$ 은 P 또는 As이고,
- [0176]  $Z_1$  내지  $Z_4$  및  $Z_{11}$  내지  $Z_{13}$ 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중  $R_{21}$ 에 대한 설명을 참조하고,
- [0177]  $d_1$  및  $d_2$ 는 서로 독립적으로, 0 내지 10의 정수 중에서 선택되고,
- [0178] \* 및 \*'은 상기 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.
- [0179] 상기 화학식 3A 내지 3F에 대한 설명 중  $C_5$ - $C_{30}$ 카보시클릭 그룹 및  $C_1$ - $C_{30}$ 헤테로시클릭 그룹에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 고리  $CY_{21}$ 에 대한 설명을 참조한다.



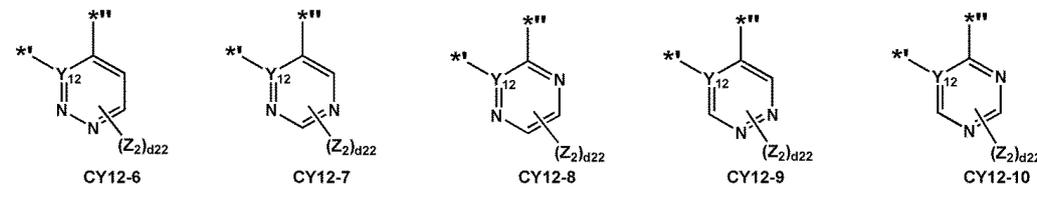
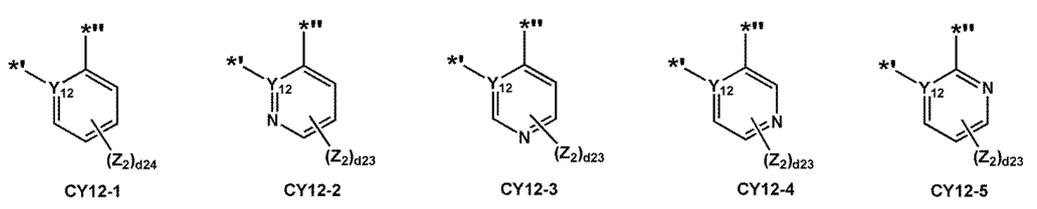
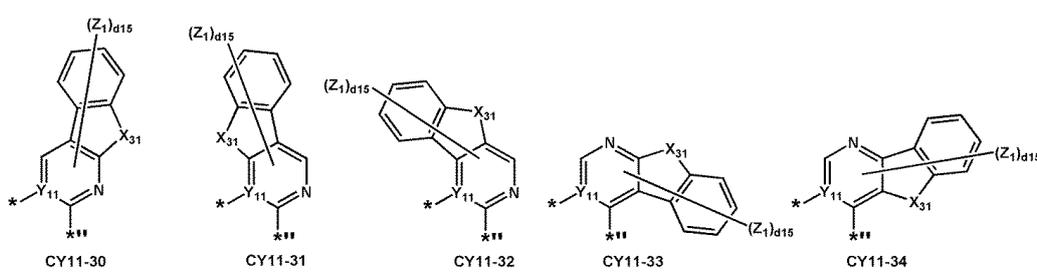
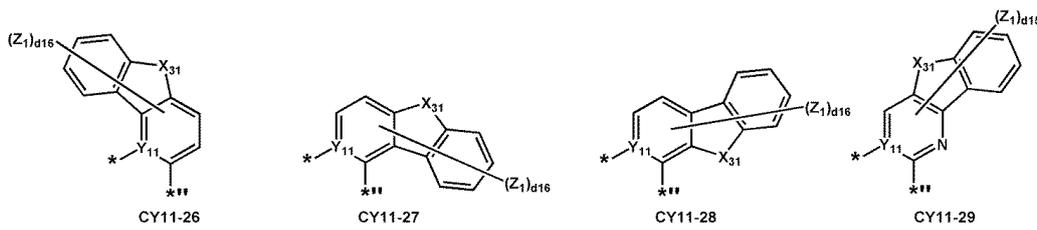
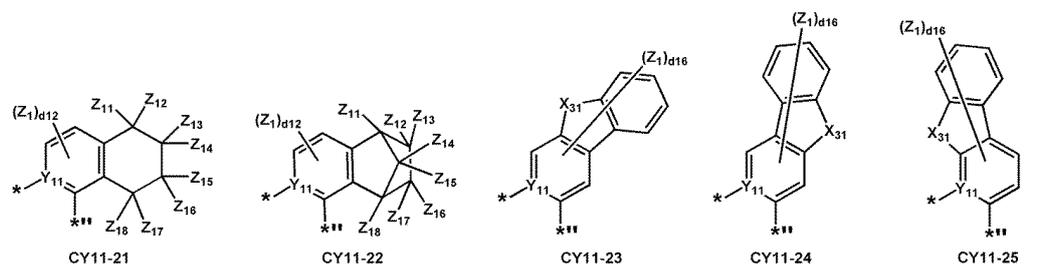
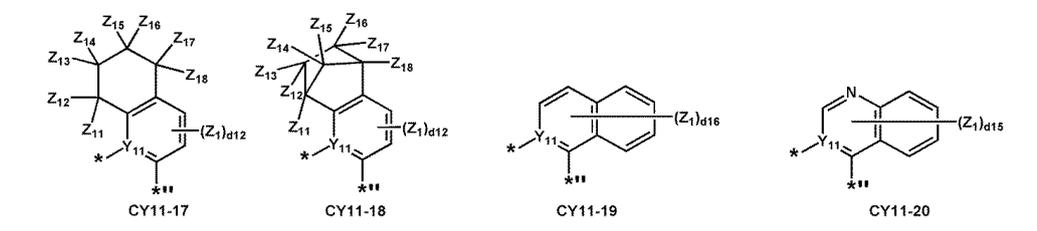
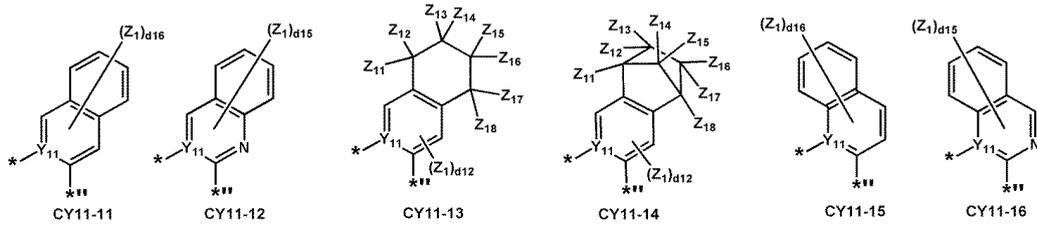
- [0180] 예를 들어, 상기 화학식 3D의 로 표시된 모이어티는 하기 화학식  $CY_{11-1}$  내지  $CY_{11-34}$ 로 표시된 그룹 중에서 선택되고, 및/또는



- [0181] 상기 화학식 3C 및 3D의 그룹 중에서 선택될 수 있다:



- [0182]

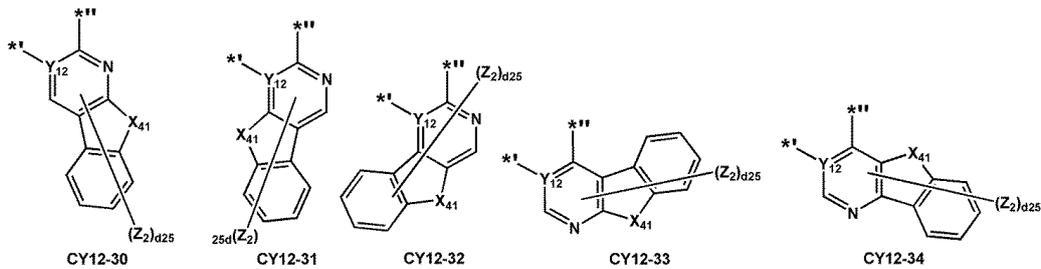
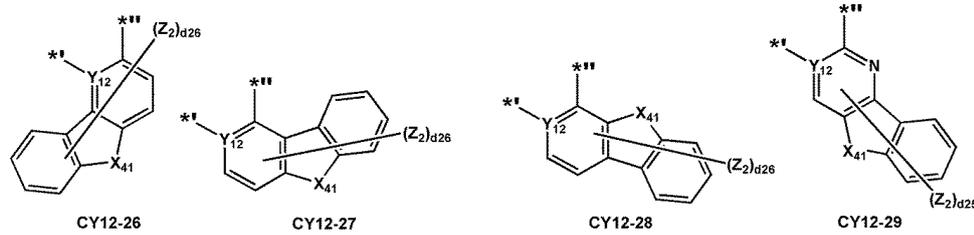
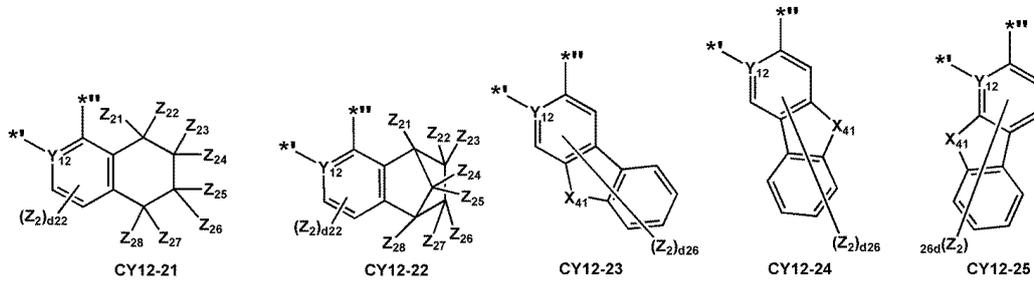
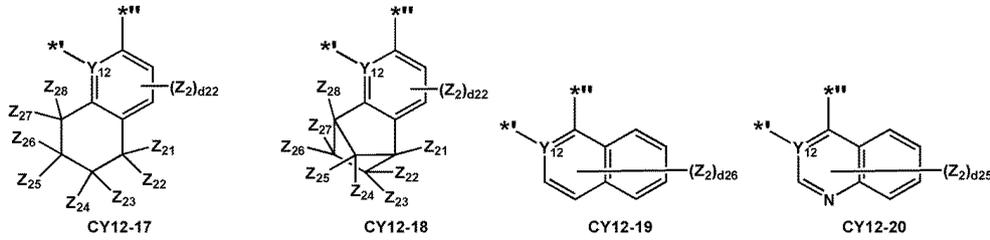
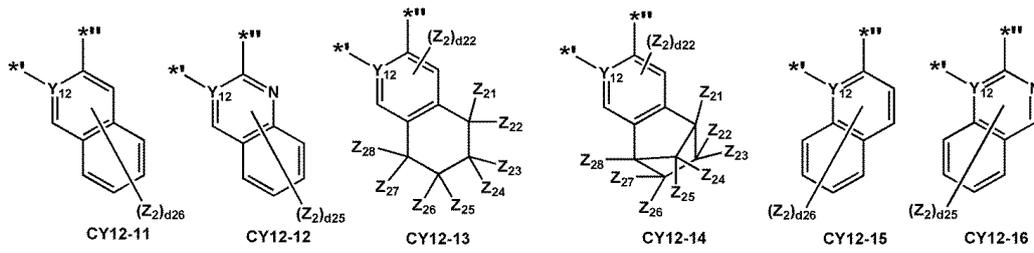


[0183]

[0184]

[0185]

[0186]



[0187]

[0188]

[0189]

[0190]

[0191]

[0192]

[0193]

[0194]

[0195]

[0196]

[0197]

상기 화학식 CY11-1 내지 CY11-34 및 CY12-1 내지 CY12-34 중,

X<sub>31</sub>은 O, S, N(Z<sub>11</sub>), C(Z<sub>11</sub>)(Z<sub>12</sub>) 또는 Si(Z<sub>11</sub>)(Z<sub>12</sub>)이고,

X<sub>41</sub>은 O, S, N(Z<sub>21</sub>), C(Z<sub>21</sub>)(Z<sub>22</sub>) 또는 Si(Z<sub>21</sub>)(Z<sub>22</sub>)이고,

Y<sub>11</sub>, Y<sub>12</sub>, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서에 기재된 바를 참조하고,

Z<sub>11</sub> 내지 Z<sub>18</sub> 및 Z<sub>21</sub> 내지 Z<sub>28</sub>에 대한 설명은 각각 본 명세서 중 R<sub>21</sub>에 대한 설명을 참조하고,

d<sub>12</sub> 및 d<sub>22</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 2의 정수 중에서 선택되고,

d<sub>13</sub> 및 d<sub>23</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 3의 정수 중에서 선택되고,

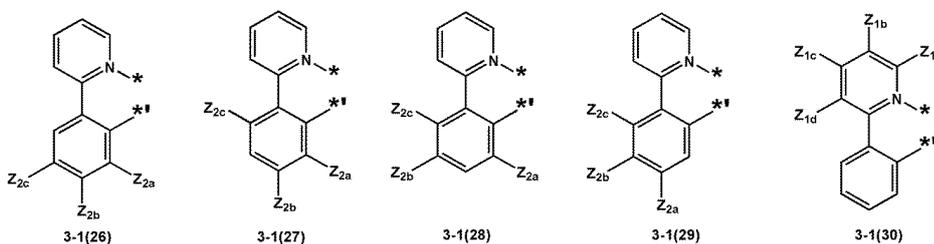
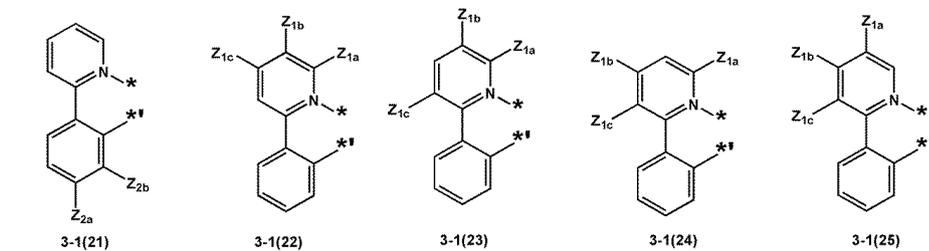
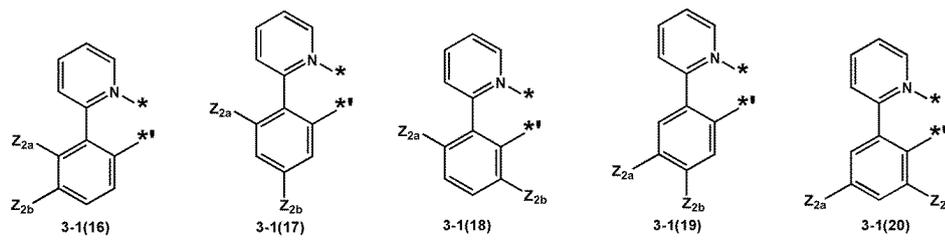
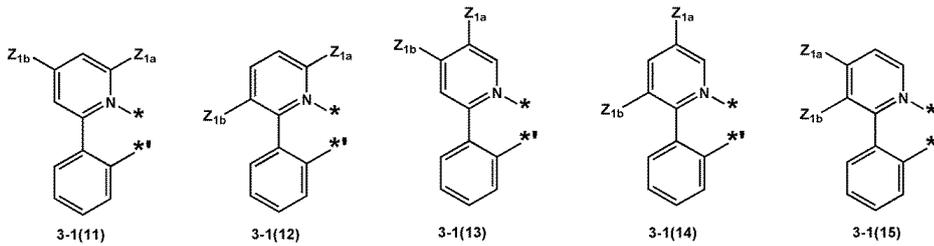
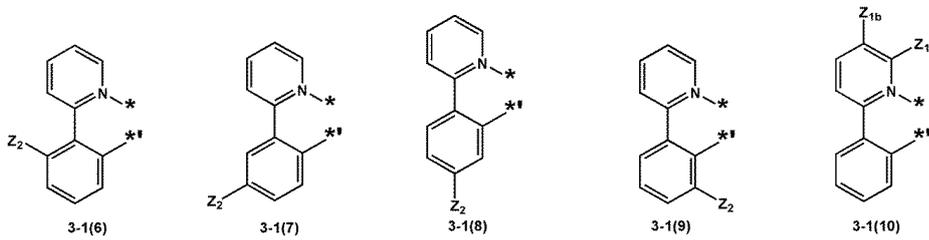
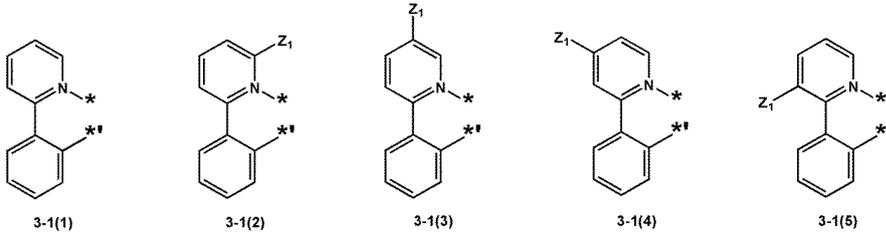
d<sub>14</sub> 및 d<sub>24</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0198] d15 및 d25는 서로 독립적으로, 0 내지 5의 정수 중에서 선택되고,

[0199] d16 및 d26은 서로 독립적으로, 0 내지 6의 정수 중에서 선택되고,

[0200] 상기 화학식 CY11-1 내지 CY11-34 및 CY12-1 내지 CY12-34 중 \* 및 \*'은 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트 이고, \*''은 화학식 3C 중 이웃한 원자 또는 화학식 3D 중 T<sub>21</sub>과의 결합 사이트이다.

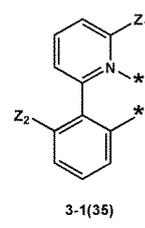
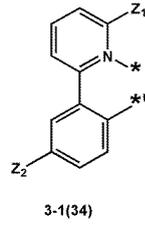
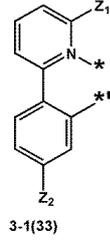
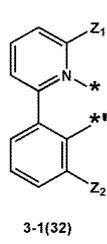
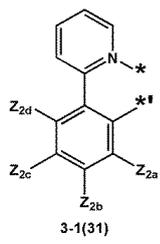
[0201] 또 다른 예로서, 상기 화학식 1 중 L<sub>2</sub>는 하기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(66) 및 3-1(301) 내지 3-1(309)로 표시되는 그룹 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



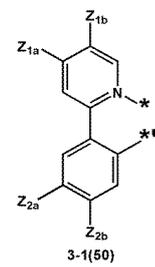
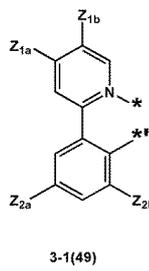
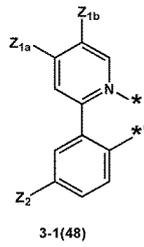
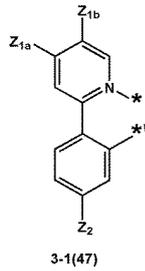
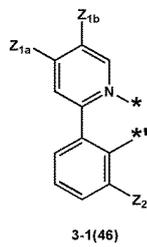
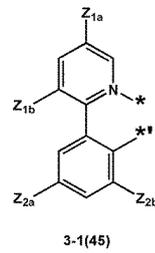
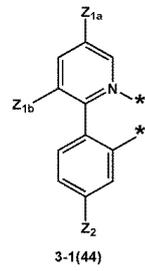
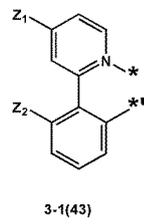
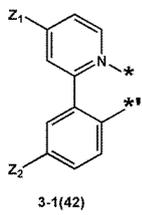
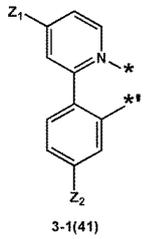
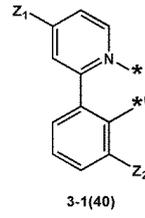
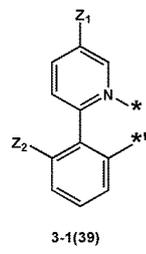
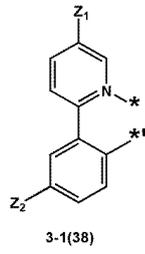
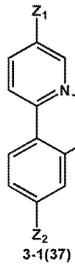
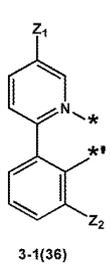
[0202]

[0203]

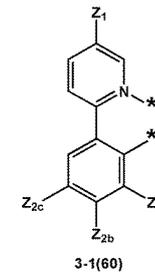
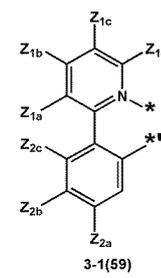
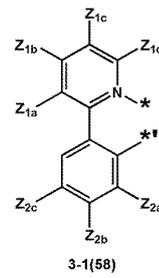
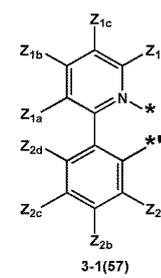
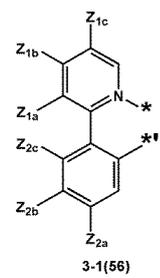
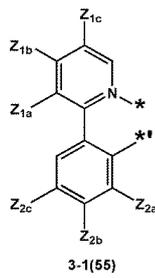
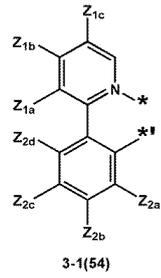
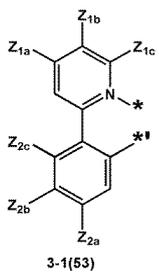
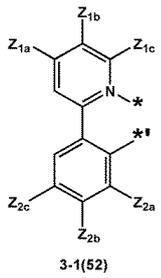
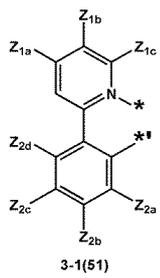
[0204]



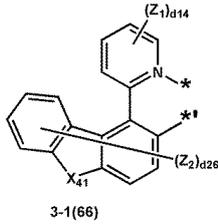
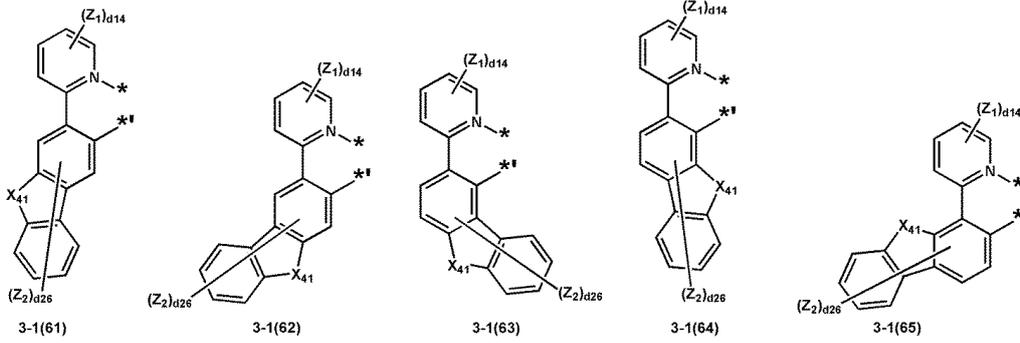
[0205]



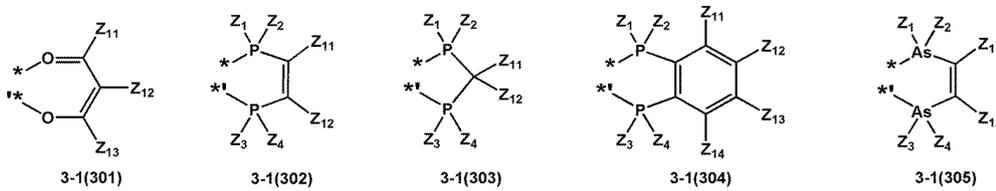
[0206]



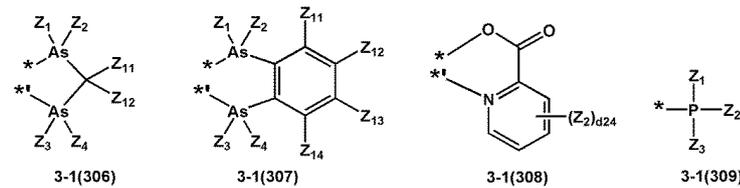
[0207]



[0208]



[0209]



[0210] 상기 화학식 3-1(1) 내지 3-1(66) 및 3-1(301) 내지 3-1(309) 중,

[0211]  $X_{41}$ 은 O, S, N( $Z_{21}$ ), C( $Z_{21}$ )( $Z_{22}$ ) 또는 Si( $Z_{21}$ )( $Z_{22}$ )이고,

[0212]  $Z_1$  내지  $Z_4$ ,  $Z_{1a}$ ,  $Z_{1b}$ ,  $Z_{1c}$ ,  $Z_{1d}$ ,  $Z_{2a}$ ,  $Z_{2b}$ ,  $Z_{2c}$ ,  $Z_{2d}$  및  $Z_{11}$  내지  $Z_{14}$ 에 대한 설명은 각각 본 명세서 중  $R_{21}$ 에 대한 설명을 참조하고,

[0213]  $d_{14}$ 는 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

[0214]  $d_{26}$ 은 0 내지 4의 정수 중에서 선택되고,

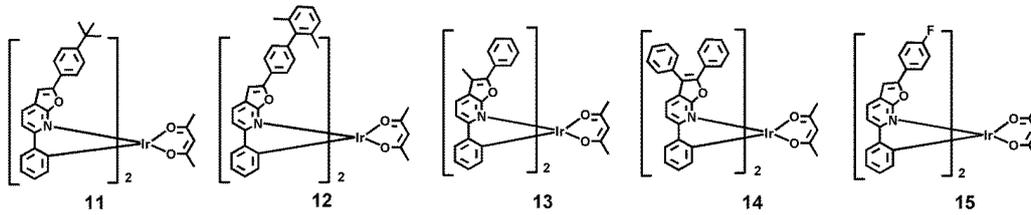
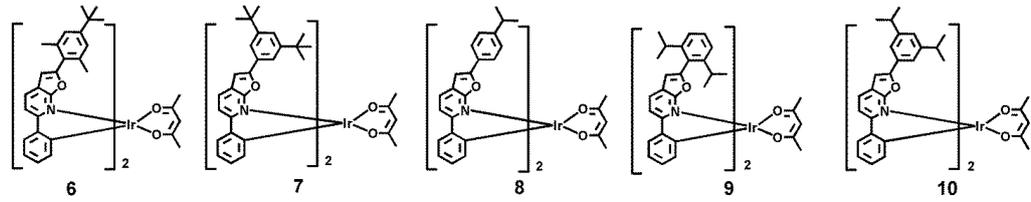
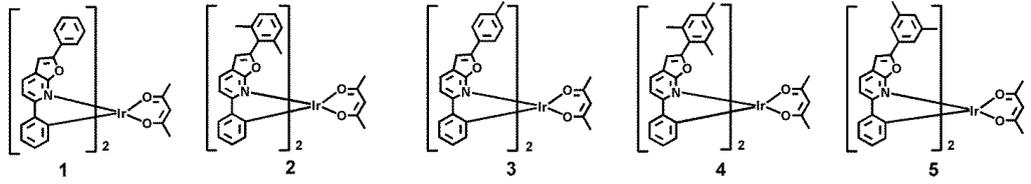
[0215] \* 및 \*'은 각각 화학식 1 중 M과의 결합 사이트이다.

[0216] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은 적색광 또는 녹색광, 예를 들면, 500nm 이상, 예를 들면, 500nm 이상 및 650nm 이하 범위의 최대 발광 파장을 갖는 적색광 또는 녹색광을 방출할 수 있다.

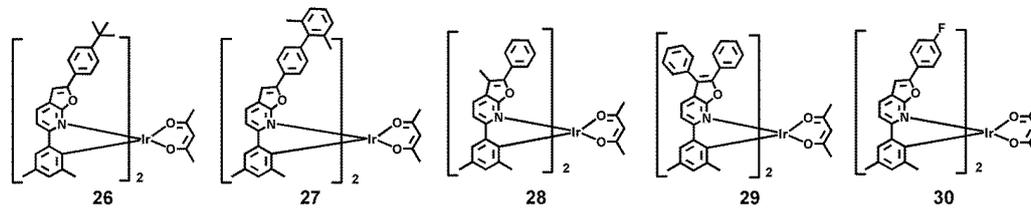
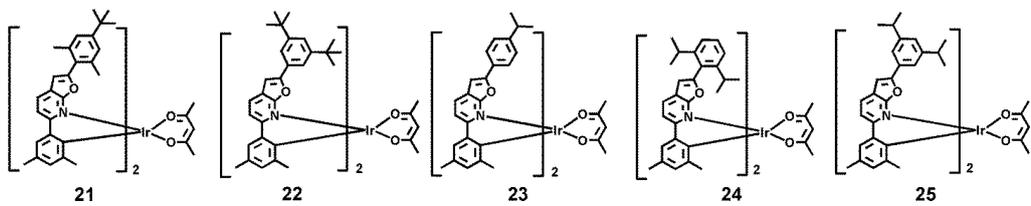
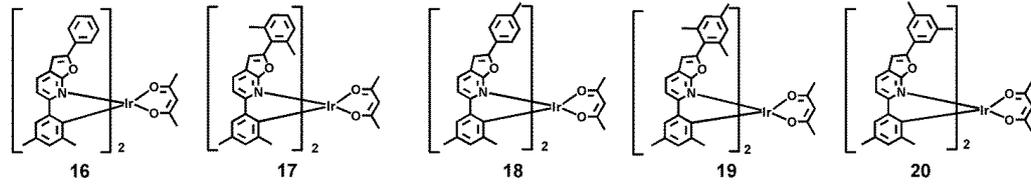
[0217] 본 명세서 중 "아자인돌 그룹, 아자벤조보롤 그룹, 아자벤조포스폴 그룹, 아자인덴 그룹, 아자벤조실롤 그룹, 아자벤조저물 그룹, 아자벤조티오펜 그룹, 아자벤조셀레노펜 그룹, 아자벤조퓨란 그룹, 아자카바졸 그룹, 아자디벤조보롤 그룹, 아자디벤조포스폴 그룹, 아자플루오렌 그룹, 아자디벤조실롤 그룹, 아자디벤조저물 그룹, 아자디벤조티오펜 그룹, 아자디벤조셀레노펜 그룹, 아자디벤조퓨란 그룹, 아자디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 아자-9H-플루오렌-9-온 그룹, 아자디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹"은 각각, "인돌 그룹, 벤조보롤 그룹, 벤조포스폴 그룹, 인덴 그룹, 벤조실롤 그룹, 벤조저물 그룹, 벤조티오펜 그룹, 벤조셀레노펜 그룹, 벤조퓨란 그룹, 카바졸 그룹, 디벤조보롤 그룹, 디벤조포스폴 그룹, 플루오렌 그룹, 디벤조실롤 그룹, 디벤조저물 그룹, 디벤조티오펜 그룹, 디벤조셀레노펜 그룹, 디벤조퓨란 그룹, 디벤조티오펜 5-옥사이드 그룹, 9H-플루오렌-9-온 그룹, 디벤조티오펜 5,5-다이옥사이드 그룹"과 동일한 백분을 갖되, 이들의 고리를 형성하는 탄소들 중 적어도 하

나가 질소로 치환된, 헤테로환을 의미한다.

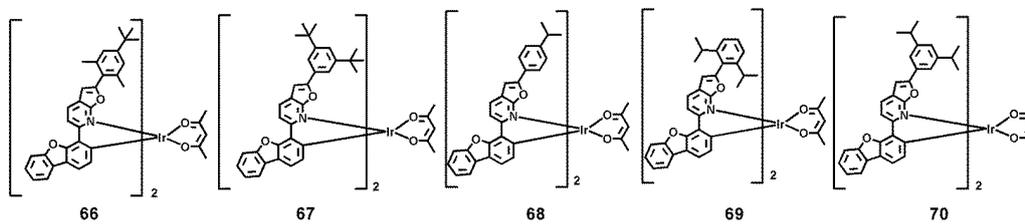
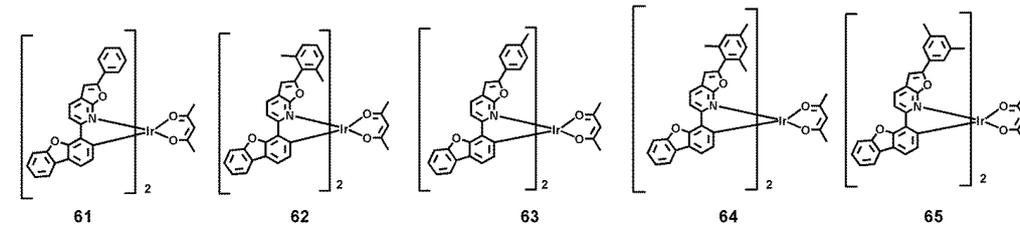
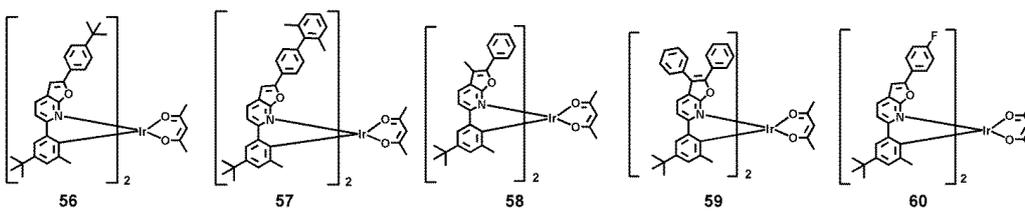
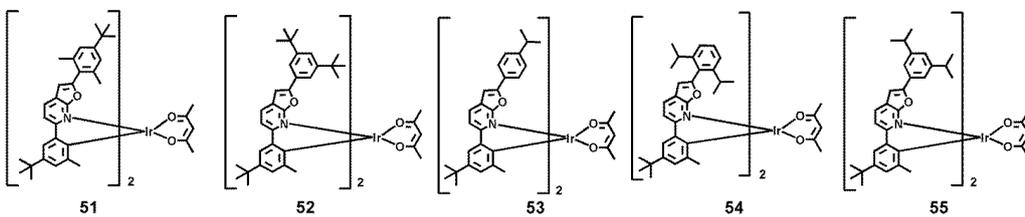
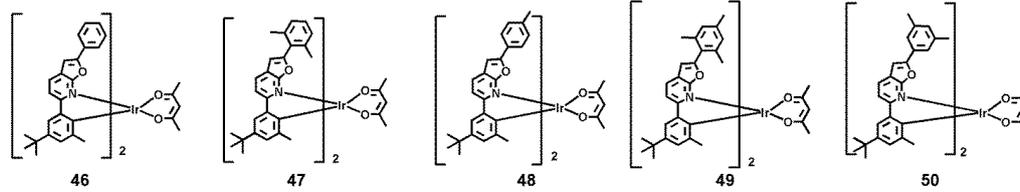
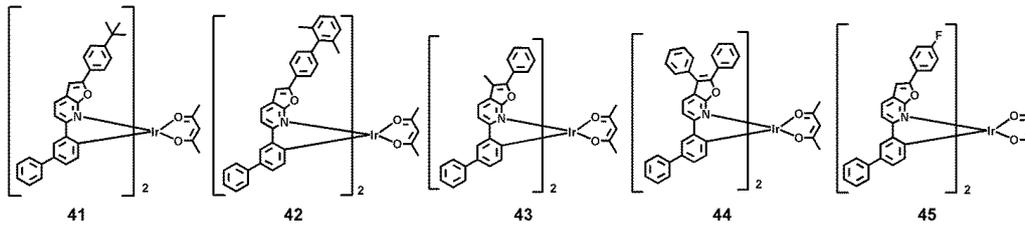
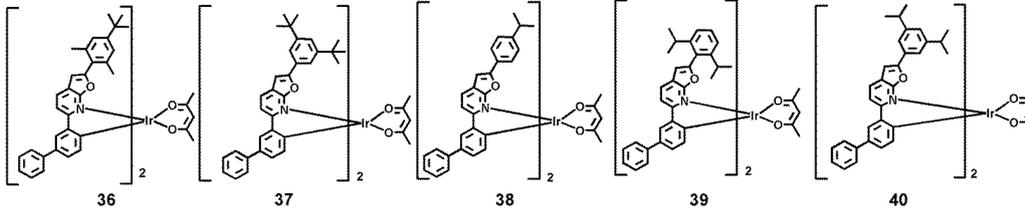
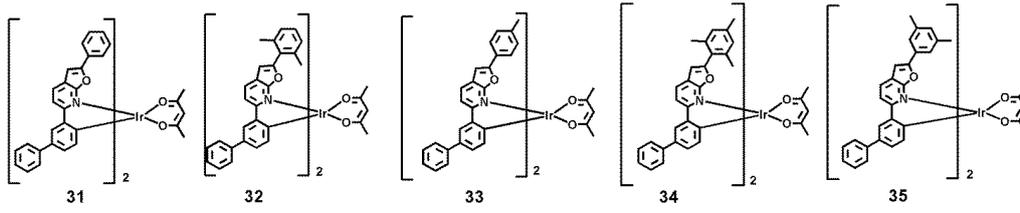
[0218] 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물은, 예를 들면, 하기 화합물 1 내지 420 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0219]



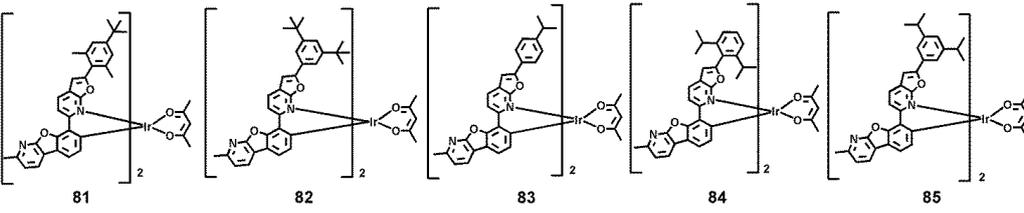
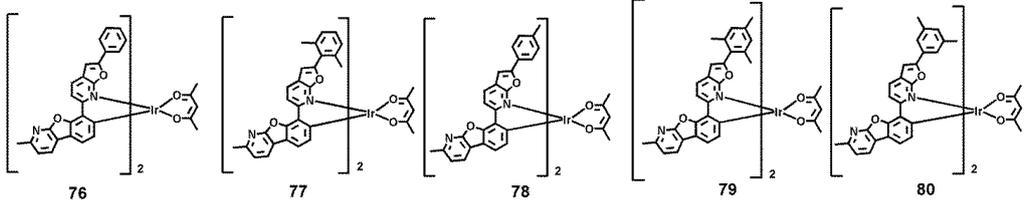
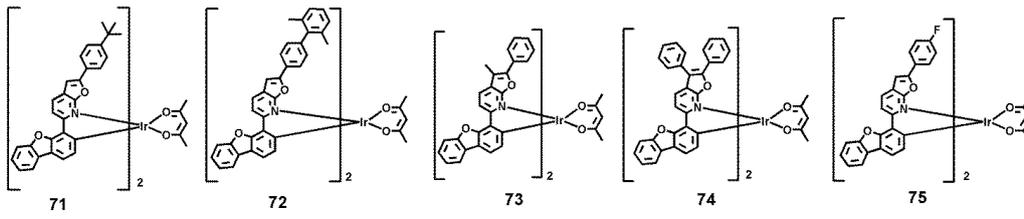
[0220]



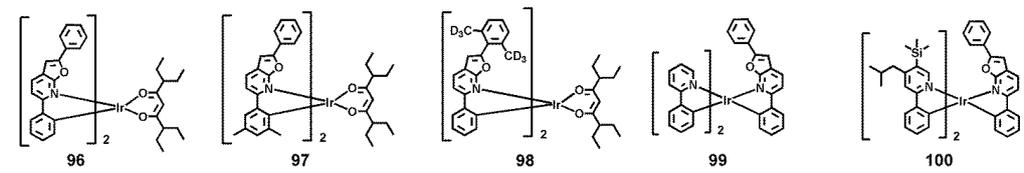
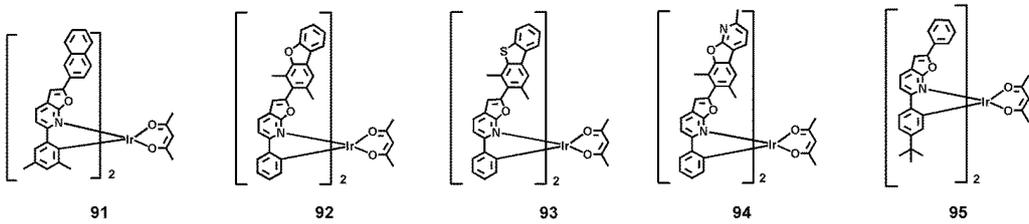
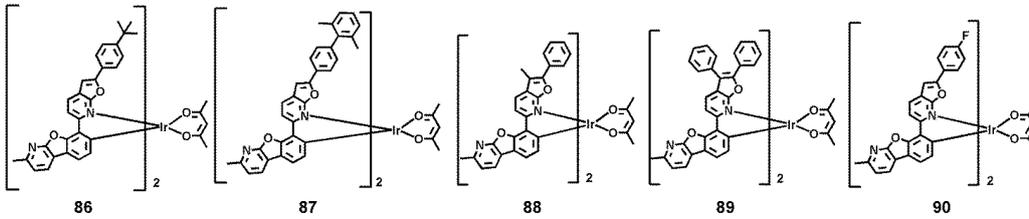
[0221]

[0222]

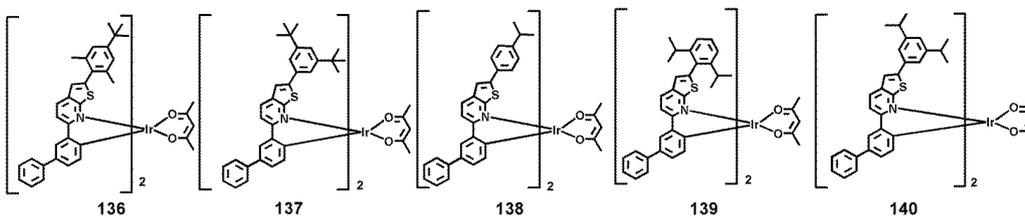
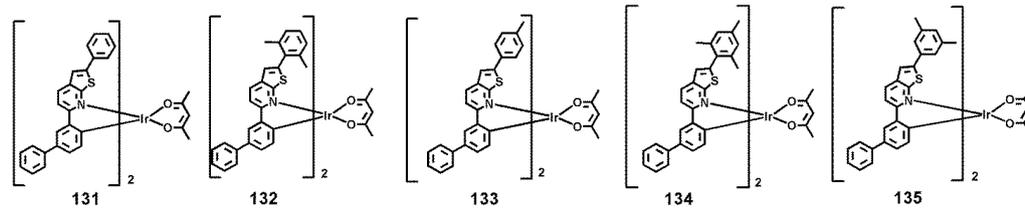
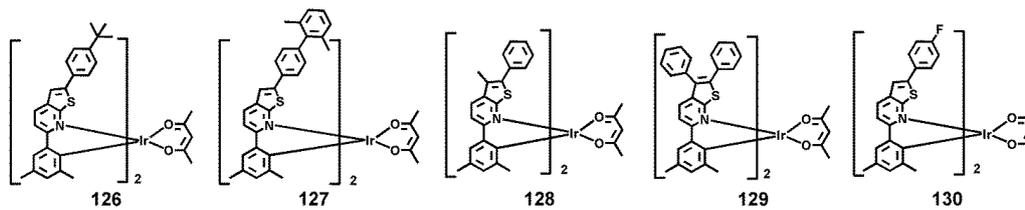
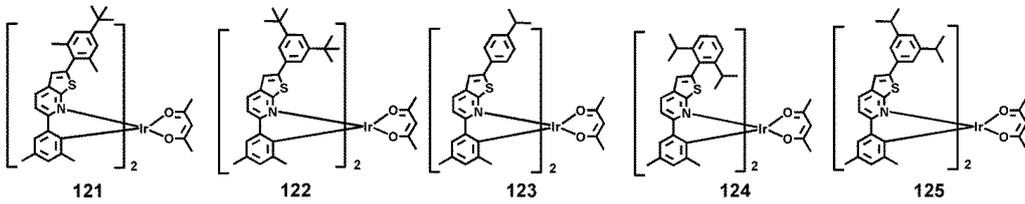
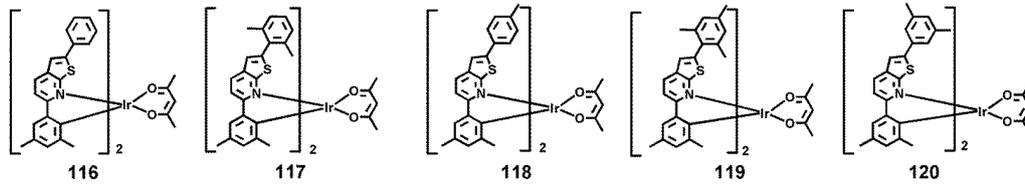
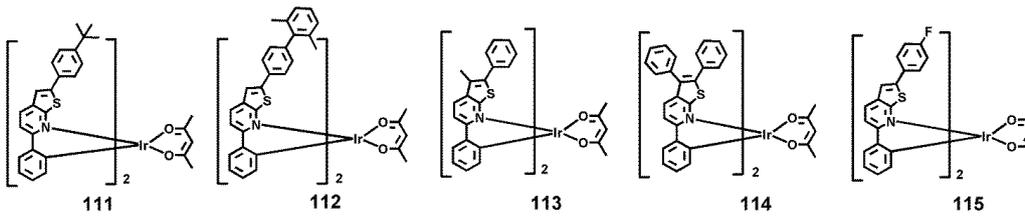
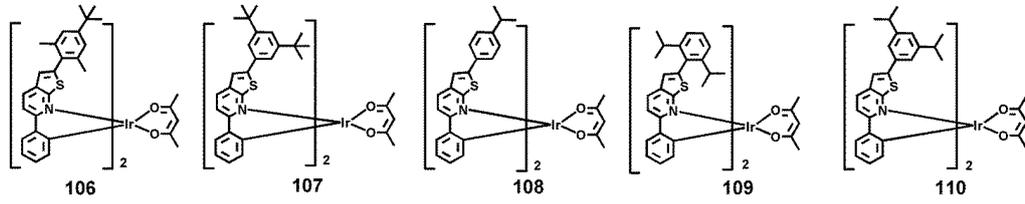
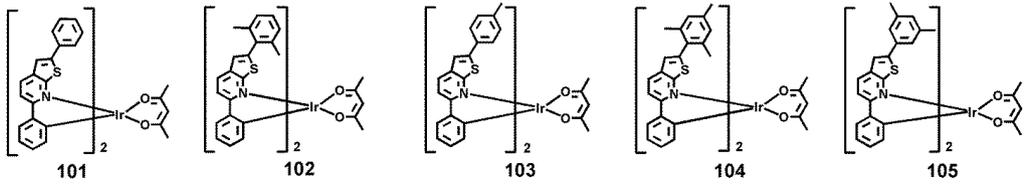
[0223]



[0224]



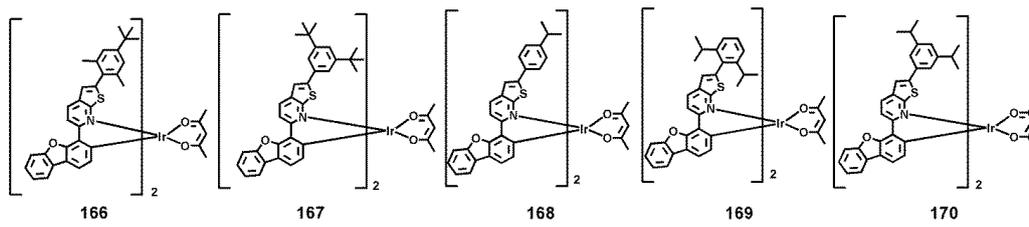
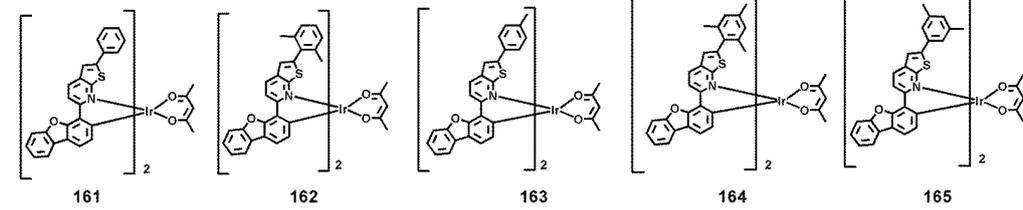
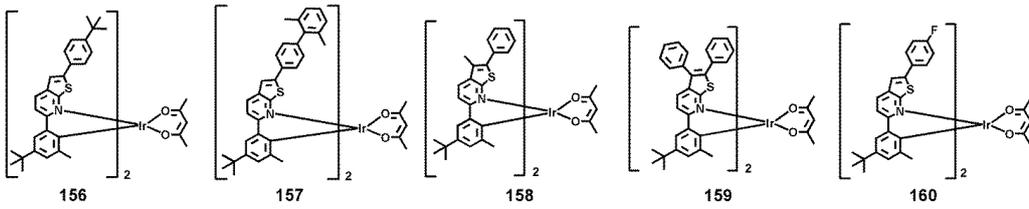
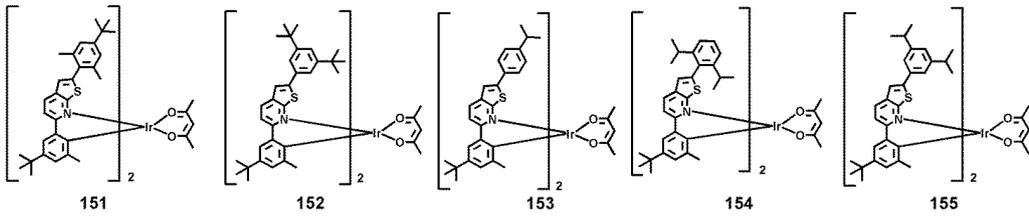
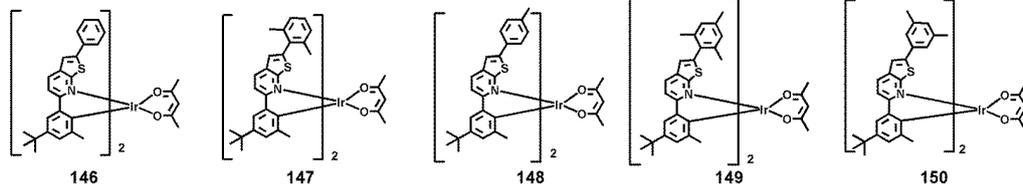
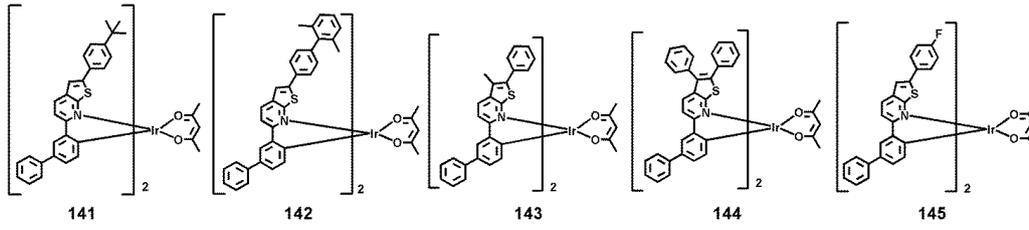
[0225]



[0226]

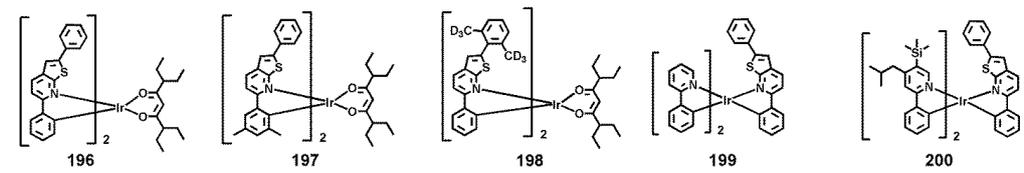
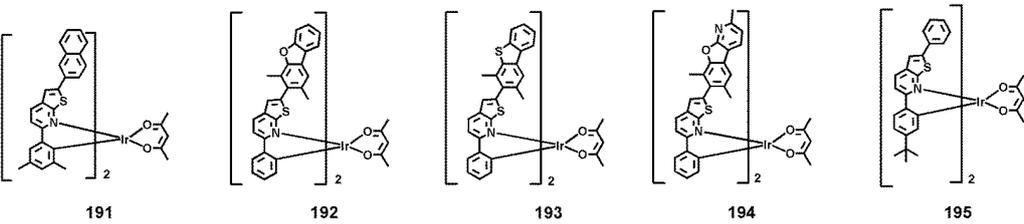
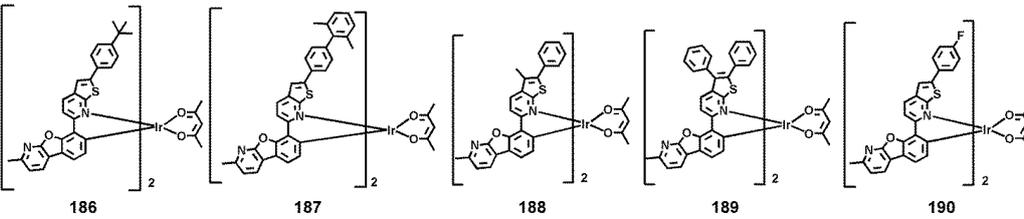
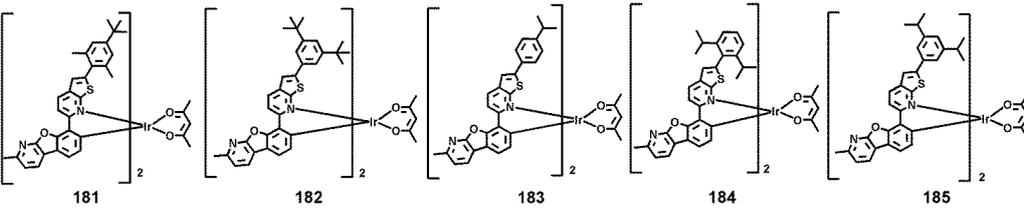
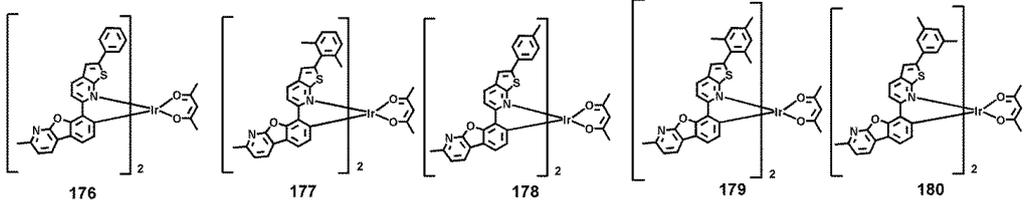
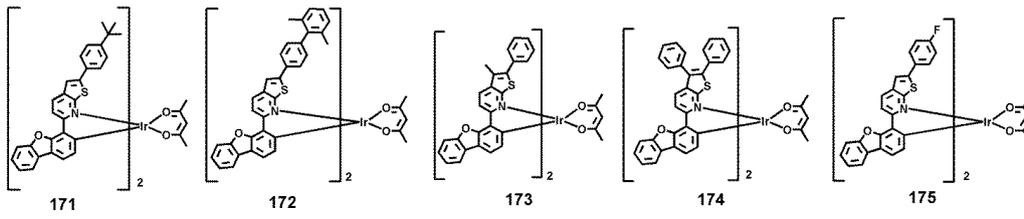
[0227]

[0228]



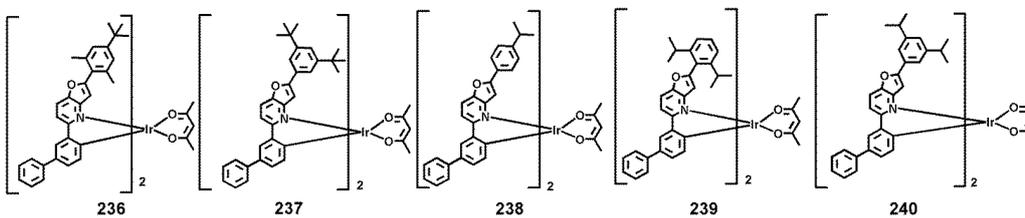
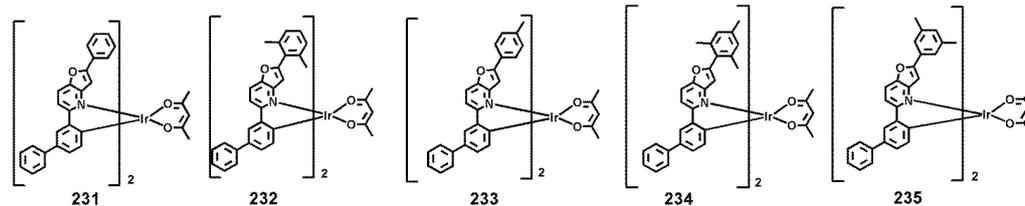
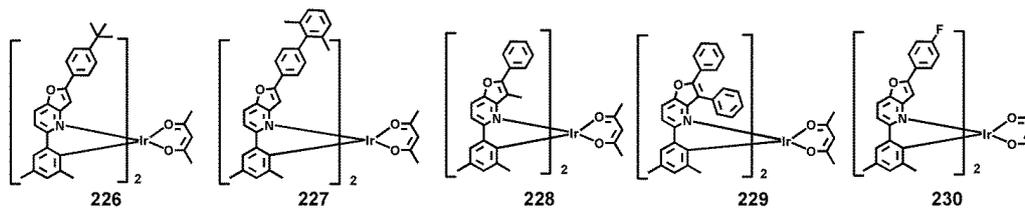
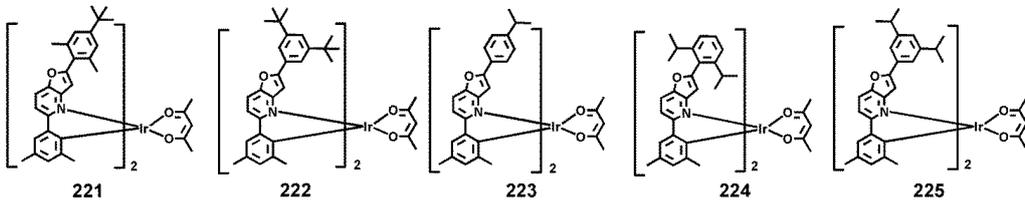
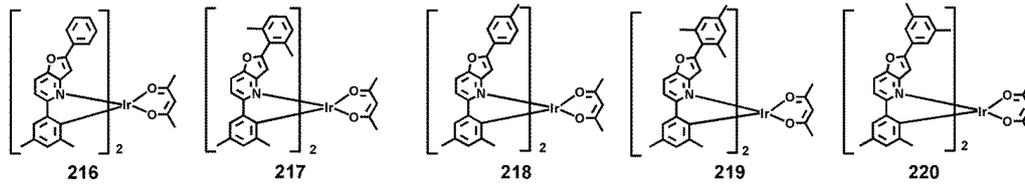
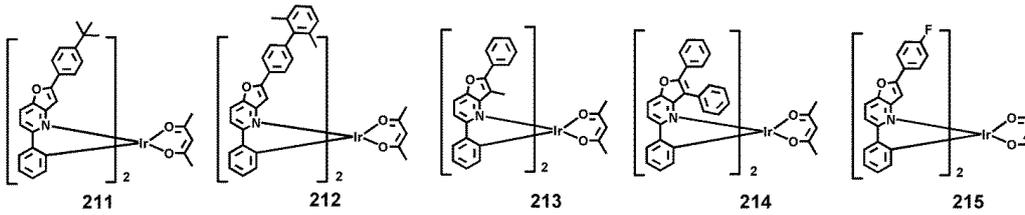
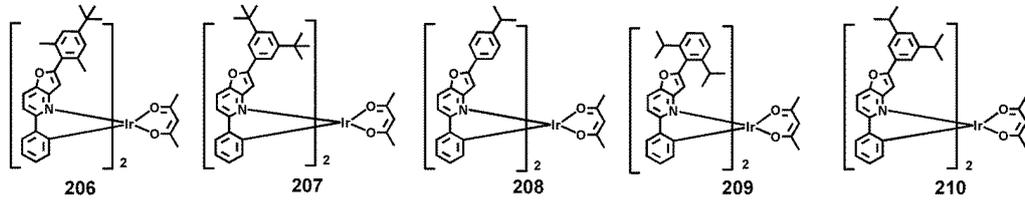
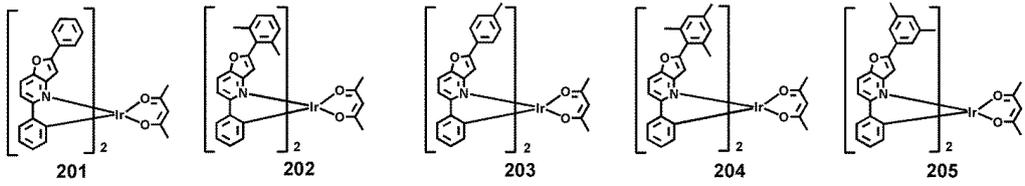
[0229]

[0230]



[0231]

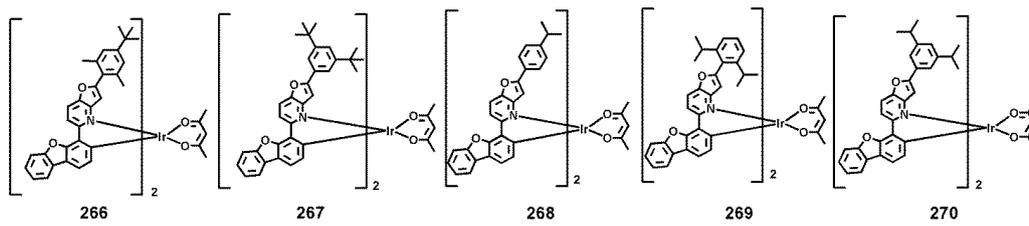
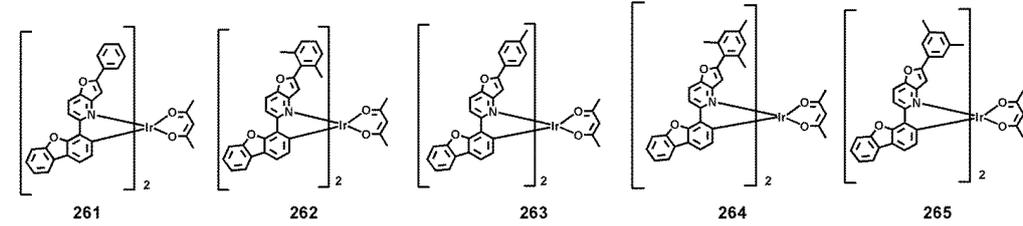
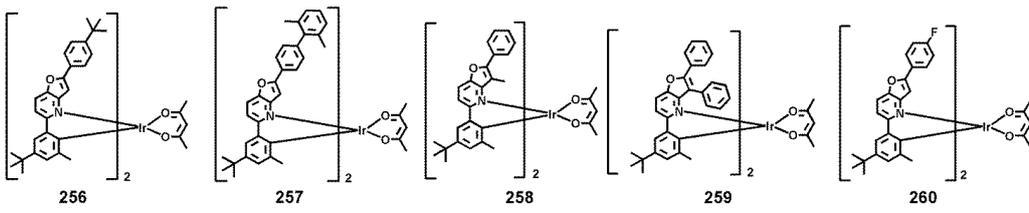
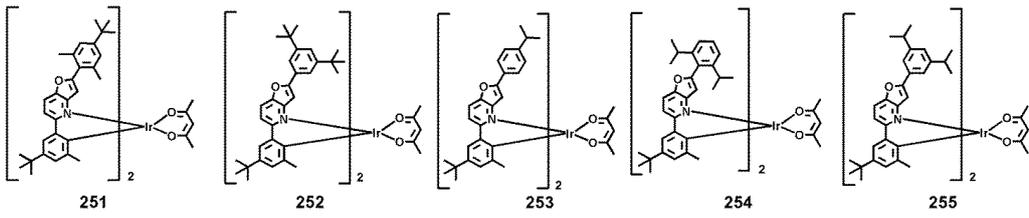
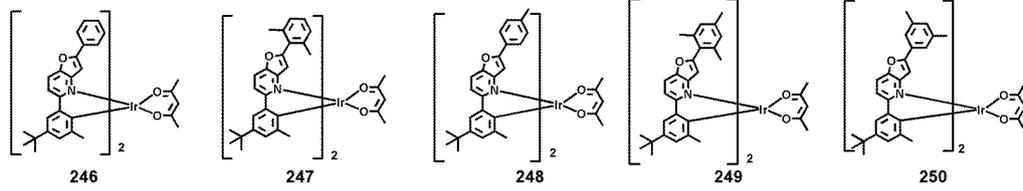
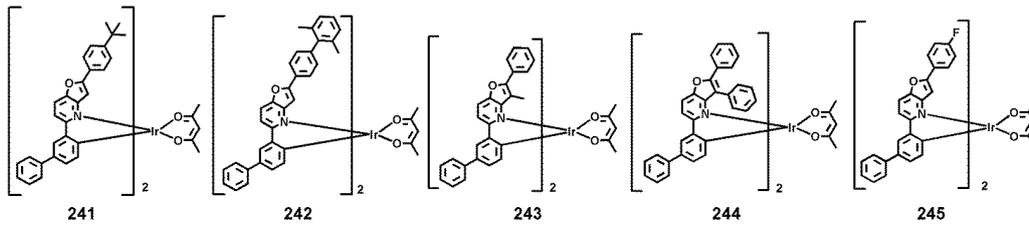
[0232]



[0233]

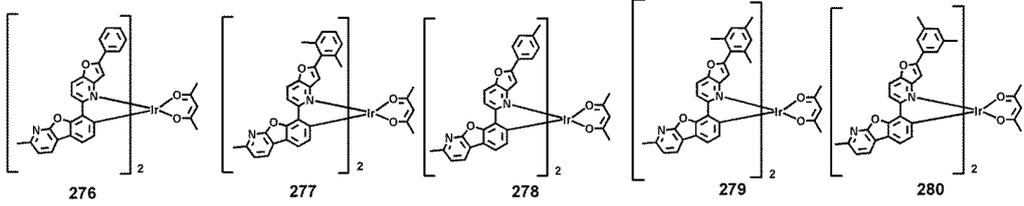
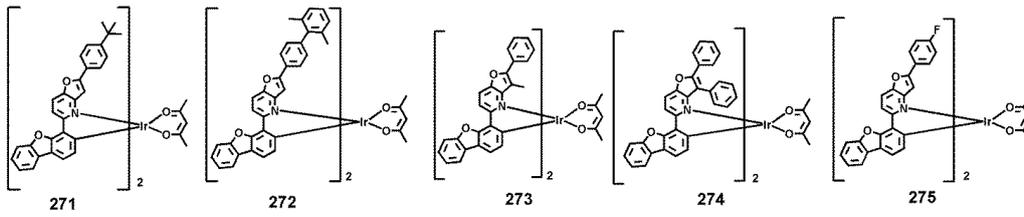
[0234]

[0235]

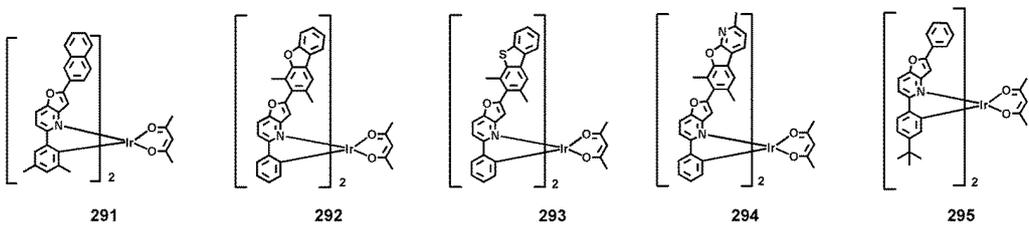
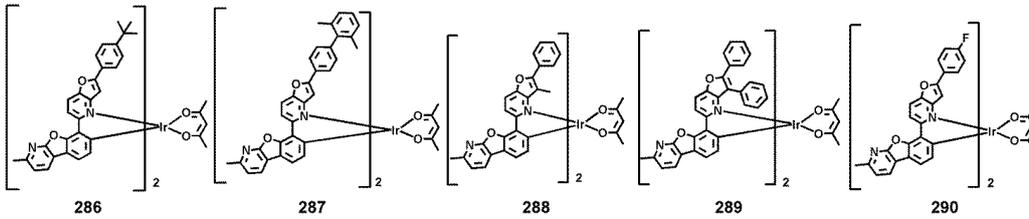
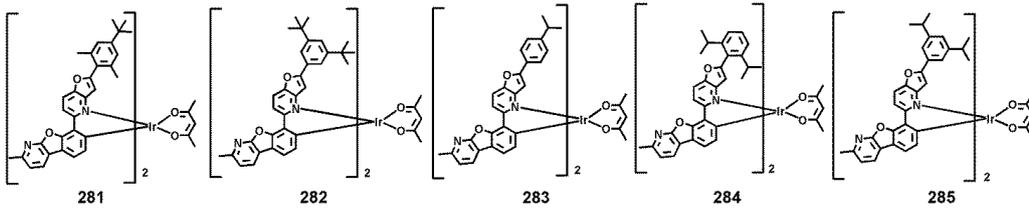


[0236]

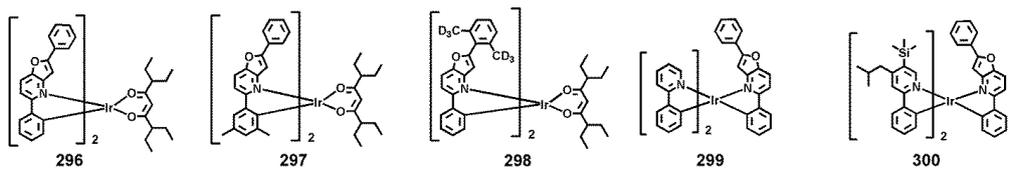
[0237]

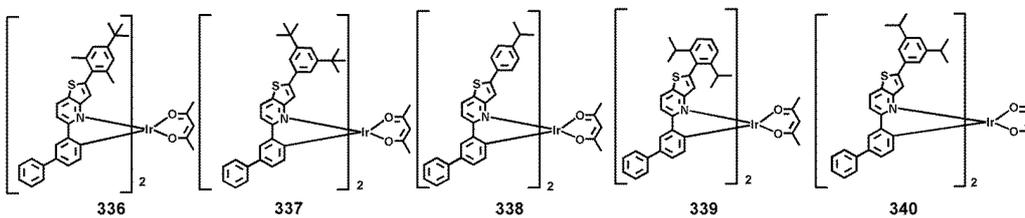
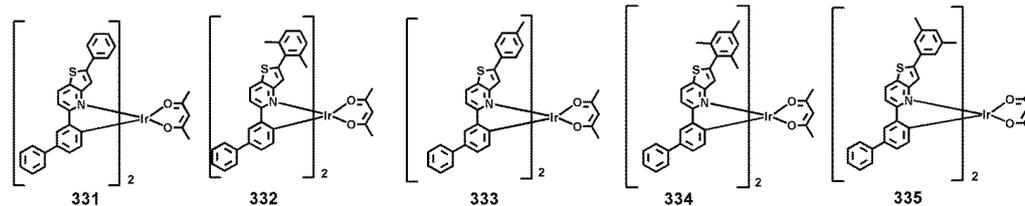
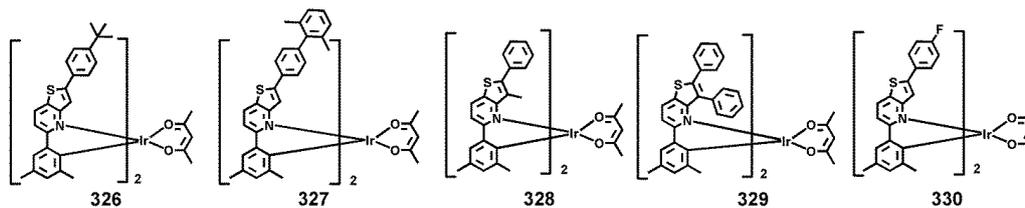
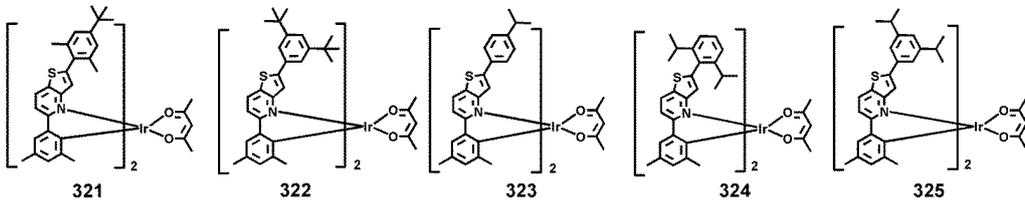
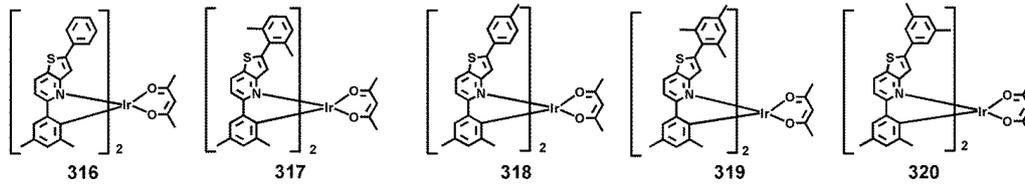
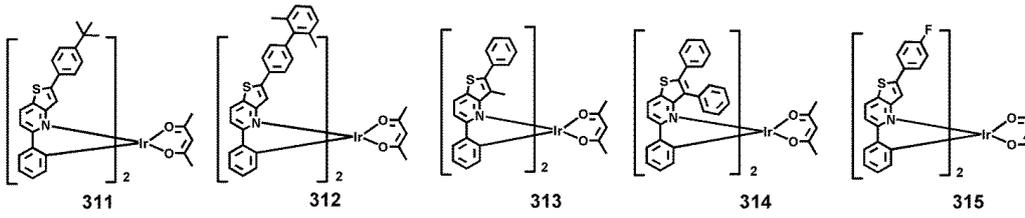
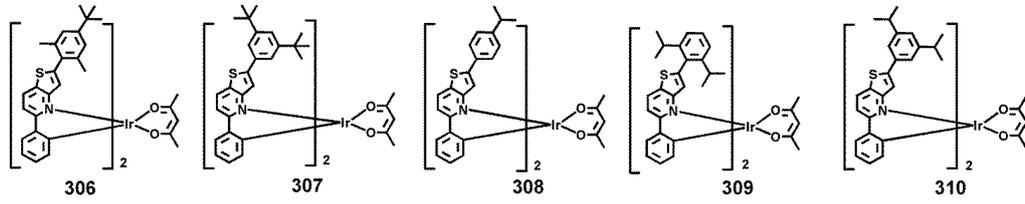
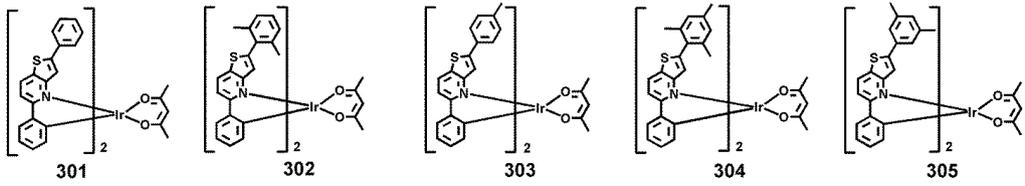


[0238]



[0239]

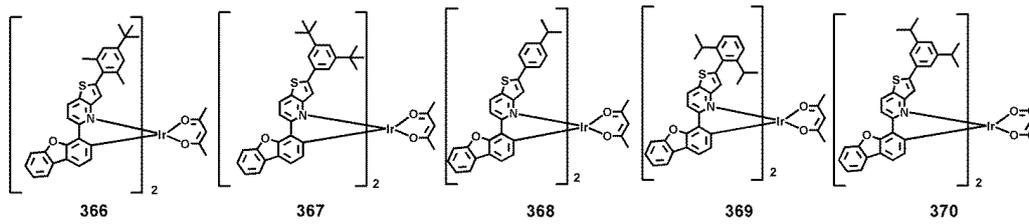
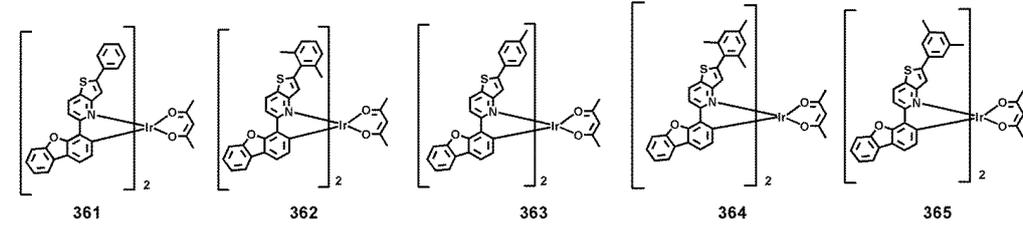
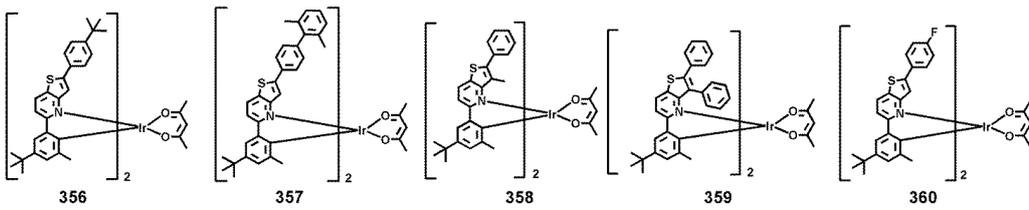
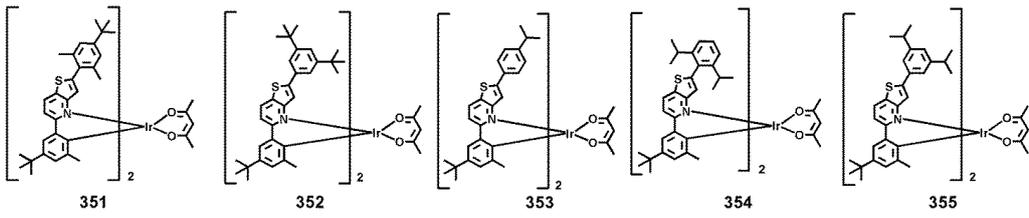
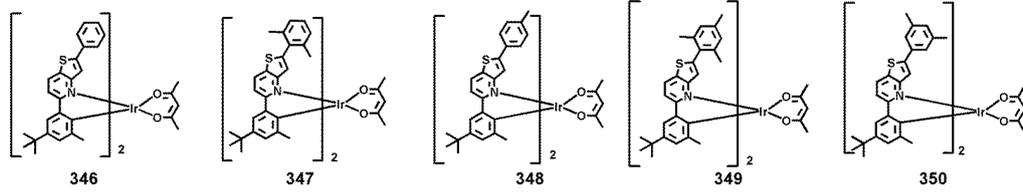
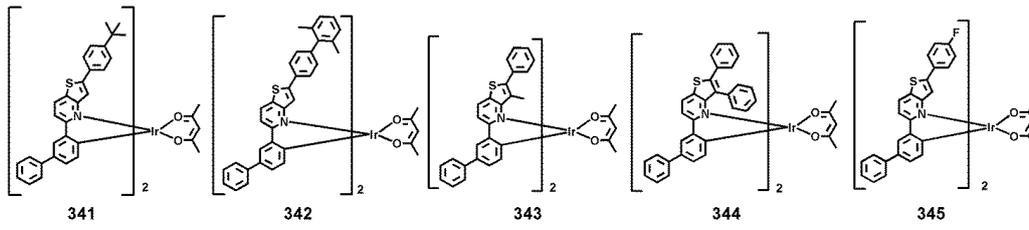




[0240]

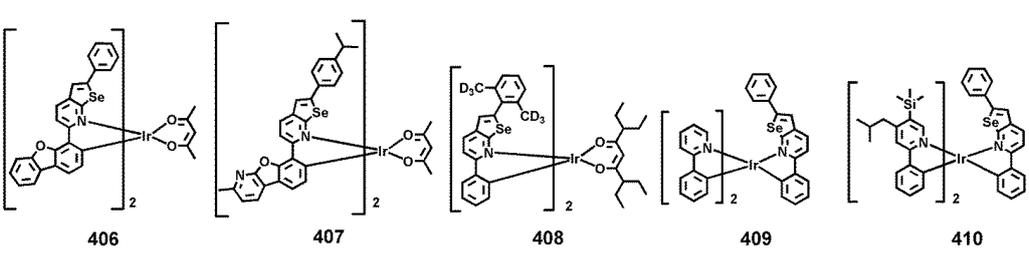
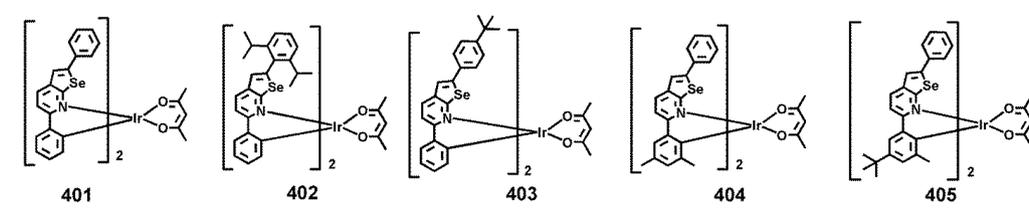
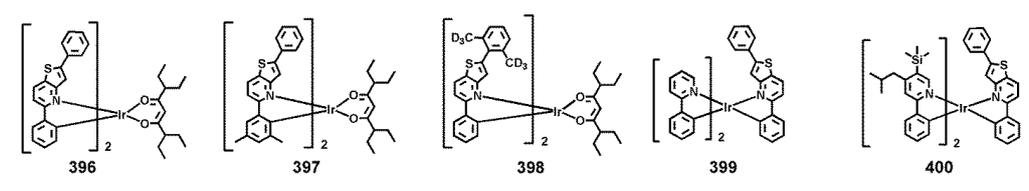
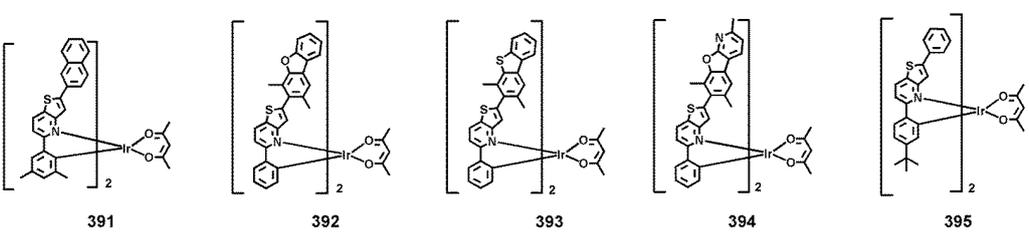
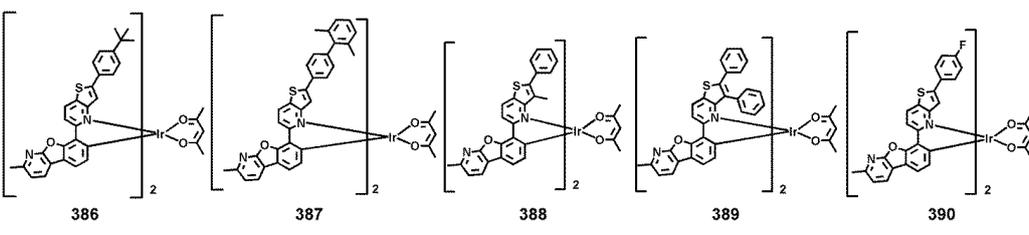
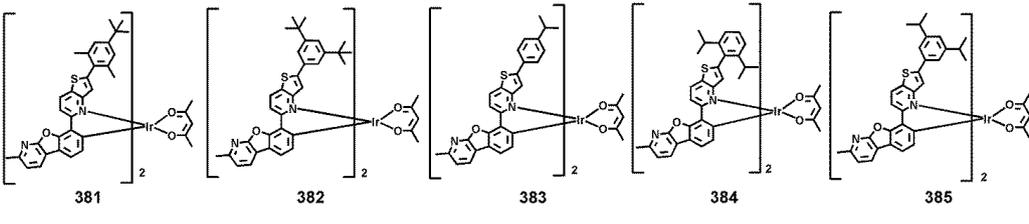
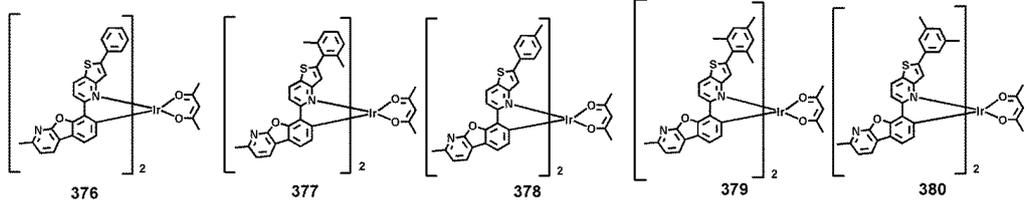
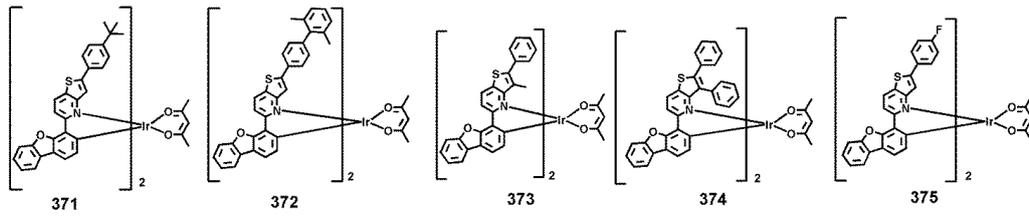
[0241]

[0242]



[0243]

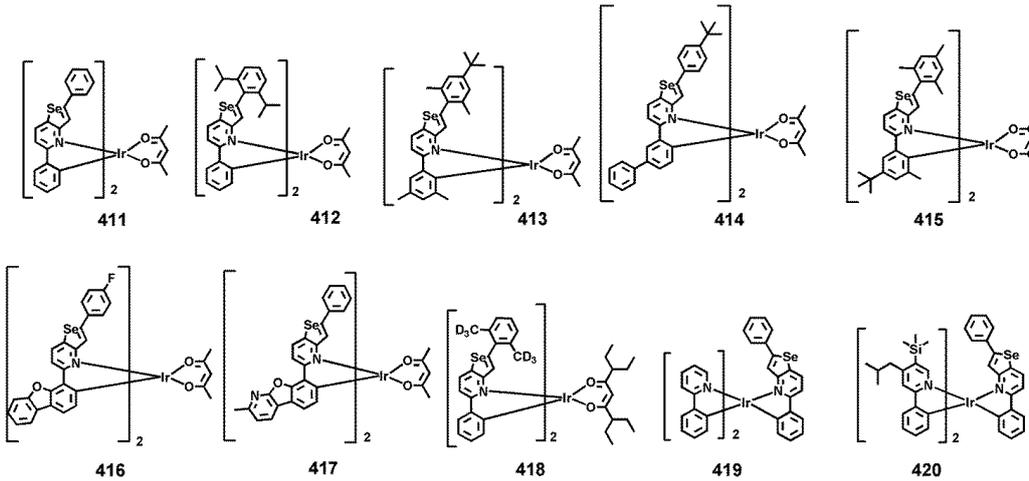
[0244]



[0245]

[0246]

[0247]



[0248]

[0249]

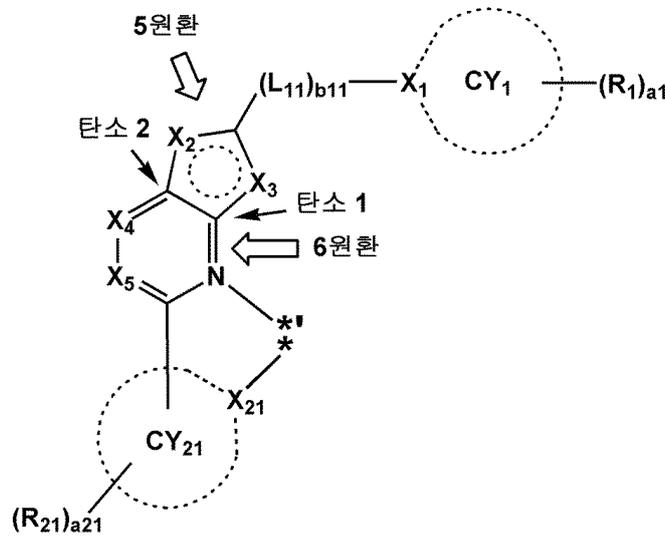
상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물 중  $L_1$ 은 상기 화학식 2로 표시된 리간드이고,  $L_1$ 의 개수인  $n_1$ 은 1, 2 또는 3이다. 즉, 상기 유기금속 화합물은 금속 M과 결합된 리간드로서, 적어도 하나의 상기 화학식 2로 표시된 리간드를 반드시 포함한다.

[0250]

상기 화학식 2로 표시된 리간드 중  $X_2$  및  $X_3$ 은 서로 독립적으로, O, S, Se 또는  $C(R_2)$ 이되,  $X_2$  및  $X_3$  중 하나는 O, S 또는 Se이다. 즉, 상기 화학식 2 중 5원환(하기 화학식 2' 참조)은 고리-형성 원자로서  $=N-*$ (상기 \* 및 \*'은 각각 이웃한 원자와의 결합 사이트임)를 비포함하고, O, S 또는 Se 중 하나를 포함한다. 또한, 상기 화학식 2 중 5원환은 탄소 1 및 2를 공유하면서, 6원환에 축합되어 있다(하기 화학식 2' 참조). 이로써, 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 분자간 결합력 감소가 방지될 수 있는 바, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 수명 저하가 방지될 수 있다.

[0251]

<화학식 2'>



[0252]

[0253]

상기 화학식 2로 표시된 리간드는 "고리  $CY_1$ "을 반드시 포함한다. 이로써, 화학식 1의 배향축 방향으로 전이 쌍극자(transition dipole)가 증가되어, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물의 배향이 향상될 수 있는 바, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 발광 효율이 증가될 수 있다.

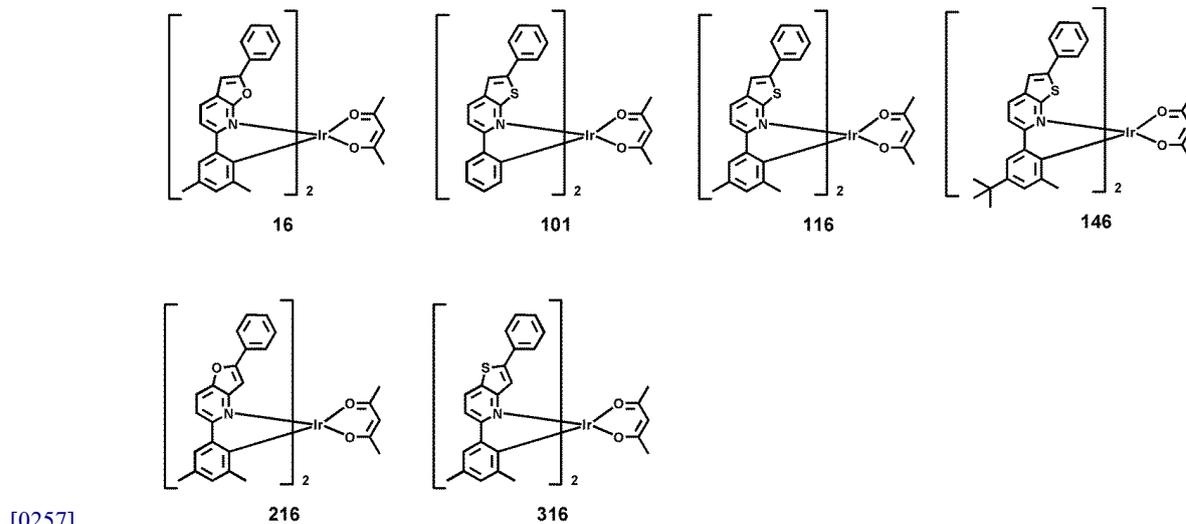
[0254]

한편, 상기 화학식 2 중 고리  $CY_1$ 과  $R_2$ 는 서로 결합하지 않고,  $R_1$ 과  $R_2$ 는 서로 결합하지 않는다. 이로써, 화학식 1의 배향축 방향이 아닌 방향으로 화학식 1의 전이 쌍극자(transition dipole)가 들어지는 것이 방지될 수 있는 바, 상기 화학식 1로 표시된 유기금속 화합물을 포함한 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 발광 효율이 증가될 수 있다.

[0255] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물 중 일부 화합물의 HOMO 에너지 레벨, LUMO 에너지 레벨 및 T<sub>1</sub> 에너지 레벨을 B3LYP 에 기반한 density functional theory (DFT)에 의한 분자 구조 최적화를 수반한 Gaussian 09 프로그램을 이용하여 평가한 결과는 하기 표 1과 같다.

표 1

화합물 No.	HOMO(eV)	LUMO(eV)	T <sub>1</sub> (eV)
16	-4.542	-1.694	2.008
101	-4.749	-1.682	2.177
116	-4.600	-1.671	2.081
146	-4.687	-1.651	2.150
216	-4.576	-1.747	2.075
316	-4.633	-1.747	2.116



[0257]

[0258] 상기 표 1로부터, 상기 화학식 1로 표시된 유기 금속 화합물은 전자 소자, 예를 들면, 유기 발광 소자의 도펀트로 사용하기에 적합한 전기적 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0259] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 합성 방법은, 후술하는 합성예를 참조하여, 당업자가 인식할 수 있다.

[0260] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 유기층, 예를 들면, 상기 유기층 중 발광층의 도펀트로 사용하기 적합할 수 있는 바, 다른 측면에 따르면, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 배치되고, 발광층을 포함하고, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 적어도 1종 이상 포함한 유기층;을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0261] 상기 유기 발광 소자는 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한 유기층을 구비함으로써, 구동 전압, 외부 양자 발광 효율, 물-오프비 및 수명 특성이 향상될 수 있다.

[0262] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 상기 발광층에 포함되어 있을 수 있다. 이 때, 상기 유기금속 화합물은 도펀트의 역할을 하고, 상기 발광층은 호스트를 더 포함할 수 있다(즉, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물의 함량은 상기 호스트의 함량보다 작음). 상기 발광층은 적색광 또는 녹색광을 방출할 수 있다.

[0263] 본 명세서 중 "(유기층이) 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 유기금속 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 유기금속 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0264] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기 화합물 1만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 유기금속 화합물로서, 상기

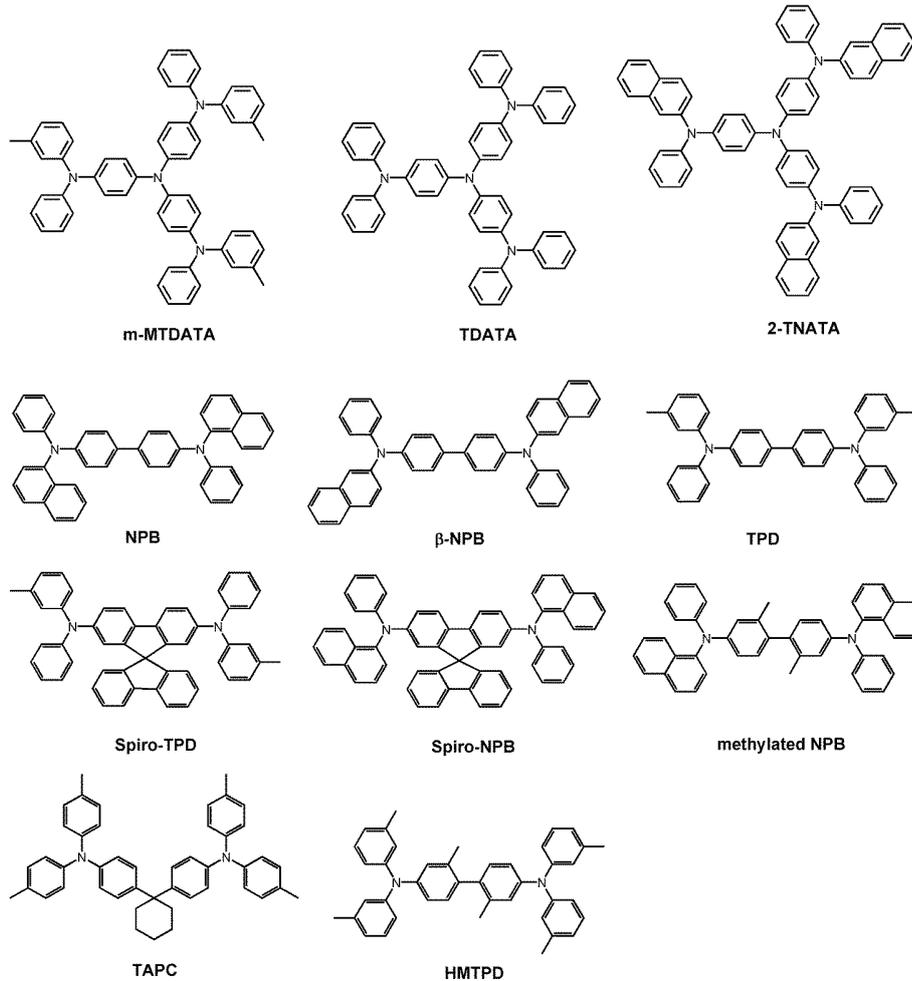
화합물 1과 화합물 2를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 1과 화합물 2는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 1과 화합물 2는 모두 발광층에 존재할 수 있음)할 수 있다.

- [0265] 상기 제1전극은 정공 주입 전극인 애노드이고 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드이거나, 상기 제1전극은 전자 주입 전극인 캐소드이고 상기 제2전극은 정공 주입 전극인 애노드이다.
- [0266] 예를 들어, 상기 유기 발광 소자 중 상기 제1전극은 애노드이고, 상기 제2전극은 캐소드이고, 상기 유기층은 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 배치된 정공 수송 영역 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 배치된 전자 수송 영역을 더 포함하고, 상기 정공 수송 영역은, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함하고, 상기 전자 수송 영역은, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0267] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다. 상기 "유기층"은 유기 화합물뿐만 아니라, 금속을 포함한 유기금속 착체 등도 포함할 수 있다.
- [0268] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다. 유기 발광 소자(10)는 제1전극(11), 유기층(15) 및 제2전극(19)이 차례로 적층된 구조를 갖는다.
- [0269] 상기 제1전극(11) 하부 또는 제2전극(19) 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 통상적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있는데, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.
- [0270] 상기 제1전극(11)은 예를 들면, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등을 이용하여 제공함으로써 형성될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 애노드일 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있다. 상기 제1전극(11)은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 제1전극용 물질로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등을 이용할 수 있다. 또는, 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등과 같은 금속을 이용할 수 있다.
- [0271] 상기 제1전극(11)은 단일층 또는 2 이상의 층을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 제1전극(11)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0272] 상기 제1전극(11) 상부로는 유기층(15)이 배치되어 있다.
- [0273] 상기 유기층(15)은 정공 수송 영역(hole transport region); 발광층(emission layer); 및 전자 수송 영역(electron transport region);을 포함할 수 있다.
- [0274] 상기 정공 수송 영역은 제1전극(11)과 발광층 사이에 배치될 수 있다.
- [0275] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 저지층, 버퍼층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.
- [0276] 상기 정공 수송 영역은 정공 주입층만을 포함하거나, 정공 수송층만을 포함할 수 있다. 또는, 상기 정공 수송 영역은, 제1전극(11)로부터 차례로 적층된, 정공 주입층/정공 수송층 또는 정공 주입층/정공 수송층/전자 저지층의 구조를 가질 수 있다.
- [0277] 정공 수송 영역이 정공 주입층을 포함할 경우, 정공 주입층(HIL)은 상기 제1전극(11) 상부에 진공증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0278] 진공 증착법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공 주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 다르지만, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약 500℃, 진공도 약 10<sup>-8</sup> 내지 약 10<sup>-3</sup> torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0279] 스핀 코팅법에 의하여 정공 주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 약 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0280] 상기 정공 수송층 및 전자 저지층 형성 조건은 정공 주입층 형성 조건을 참조한다.

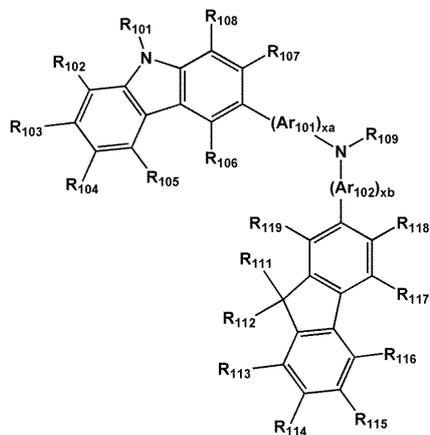
[0281] 상기 정공 수송 영역은, 예를 들면, m-MTDATA, TDATA, 2-TNATA, NPB,  $\beta$ -NPB, TPD, Spiro-TPD, Spiro-NPB, methylated-NPB, TAPC, HMTPD, TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/도데실벤젠술포산), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid: 폴리아닐린/캄퍼술포산), PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate): 폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)), 하기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 202로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:

[0282]



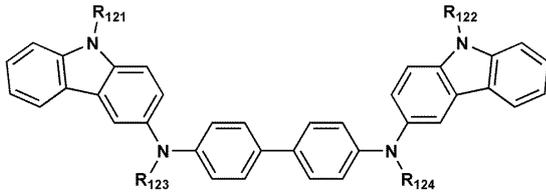
[0283]

[0284] <화학식 201>



[0285]

[0286] <화학식 202>



[0287]

[0288] 상기 화학식 201 중, Ar<sub>101</sub> 및 Ar<sub>102</sub>는 서로 독립적으로,

[0289] 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기; 및

[0290] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹 중 적어도 하나로 치환된, 페닐렌기, 펜타레닐렌기, 인데닐렌기, 나프틸렌기, 아줄레닐렌기, 헵탈레닐렌기, 아세나프틸렌기, 플루오레닐렌기, 페나레닐렌기, 페난트레닐렌기, 안트라세닐렌기, 플루오란테닐렌기, 트리페닐레닐렌기, 파이레닐렌기, 크라이세닐레닐렌기, 나프타세닐렌기, 피세닐렌기, 페틸레닐렌기 및 펜타세닐렌기;

[0291] 중에서 선택될 수 있다.

[0292] 상기 화학식 201 중, 상기 xa 및 xb는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 xa는 1이고, xb는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0293] 상기 화학식 201 및 202 중, 상기 R<sub>101</sub> 내지 R<sub>108</sub>, R<sub>111</sub> 내지 R<sub>119</sub> 및 R<sub>121</sub> 내지 R<sub>124</sub>는 서로 독립적으로,

[0294] 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등) 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 부톡시기, 펜톡시기 등);

[0295] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염 및 인산 또는 이의 염 중 하나 이상으로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기;

[0296] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 및

[0297] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 플루오레닐기 및 파이레닐기;

[0298] 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0299] 상기 화학식 201 중, R<sub>109</sub>는,

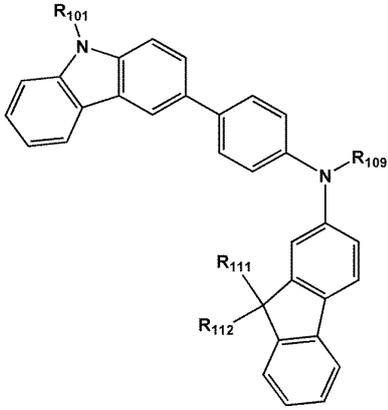
[0300] 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기; 및

[0301] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산 또는 이의 염, 술폰산 또는 이의 염, 인산 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기 중 하나 이상으로 치환된, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기 및 피리디닐기;

[0302] 중에서 선택될 수 있다.

[0303] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물은 하기 화학식 201A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

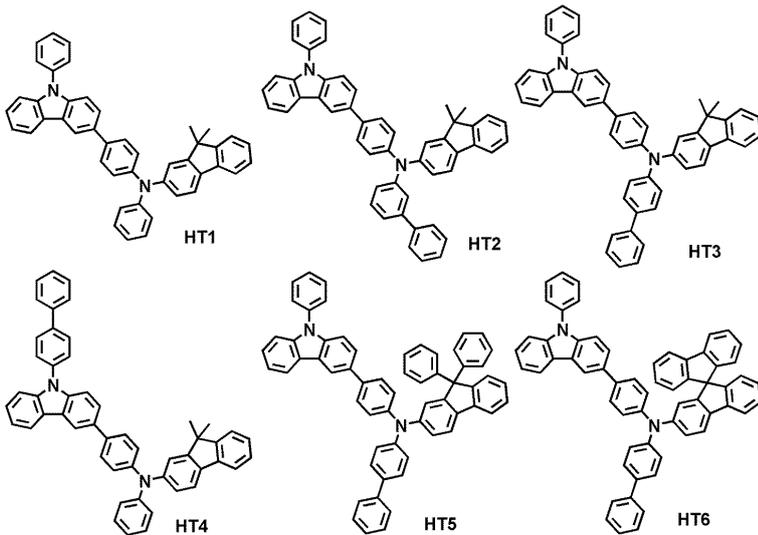
[0304] <화학식 201A>



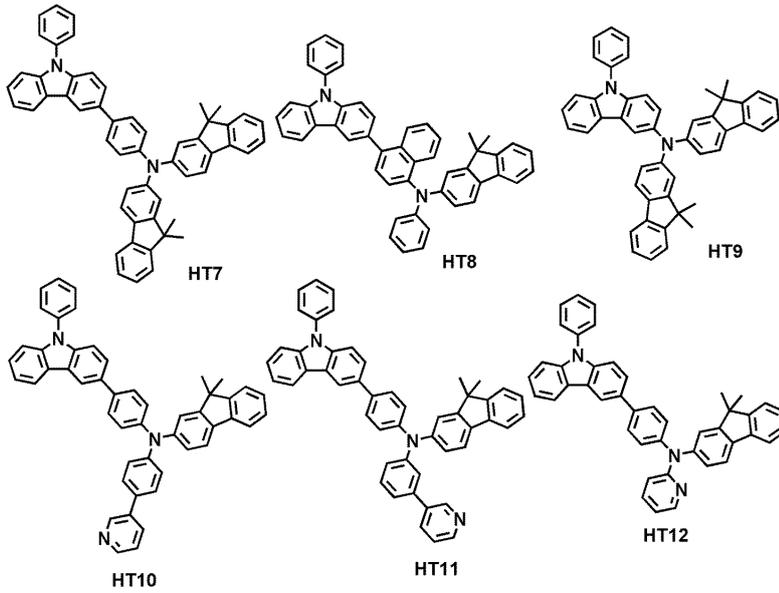
[0305]

[0306] 상기 화학식 201A 중, R<sub>101</sub>, R<sub>111</sub>, R<sub>112</sub> 및 R<sub>109</sub>에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

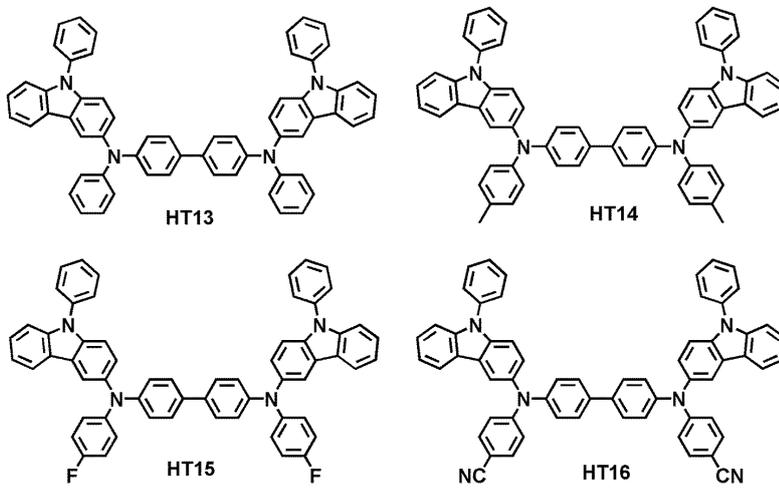
[0307] 예를 들어, 상기 화학식 201로 표시되는 화합물 및 상기 화학식 202로 표시되는 화합물은 하기 화합물 HT1 내지 HT20을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



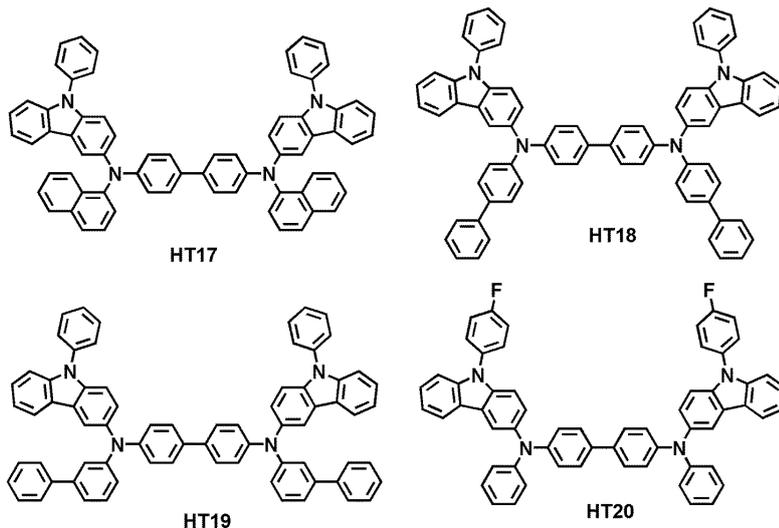
[0308]



[0309]



[0310]



[0311]

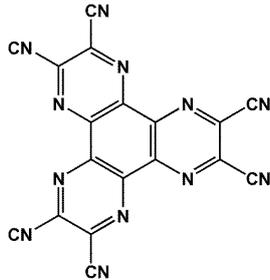
[0312]

상기 정공 수송 영역의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역이 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 하나를 포함한다면, 상기 정공 주입층의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å이고, 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송 영역, 정공 주입층 및 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성

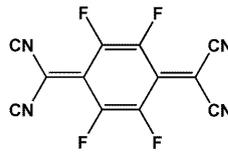
을 얻을 수 있다.

[0313] 상기 정공 수송 영역은 상술한 바와 같은 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다. 상기 전하-생성 물질은 상기 정공 수송 영역 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다.

[0314] 상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라시아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-TCNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 HT-D1 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



HT-D1



F4-TCNQ

[0315]

상기 정공 수송 영역은, 버퍼층을 더 포함할 수 있다.

[0316]

상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 수 있다.

[0317]

[0318]

상기 정공 수송 영역 상부에 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0319]

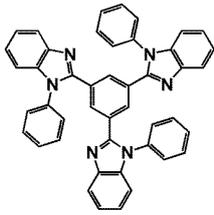
한편, 상기 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 상기 전자 저지층 재료는, 상술한 바와 같은 정공 수송 영역에 사용될 수 있는 물질 및 후술하는 호스트 물질 중에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 정공 수송 영역이 전자 저지층을 포함할 경우, 전자 저지층 재료로서, 후술하는 mCP를 사용할 수 있다.

[0320]

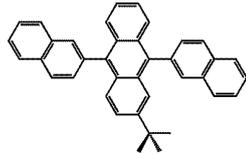
상기 발광층은 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있고, 상기 도펀트는 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 포함한다.

[0321]

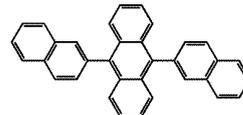
상기 호스트는 하기 TPBi, TBADN, ADN("DNA"라고도 함), CBP, CDBP, TCP, mCP, 화합물 H50 내지 화합물 H52 중 적어도 하나를 포함할 수 있다:



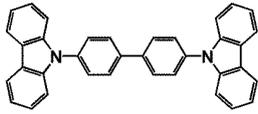
TPBi



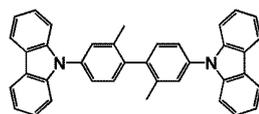
TBADN



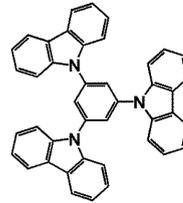
ADN



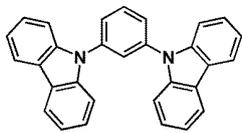
CBP



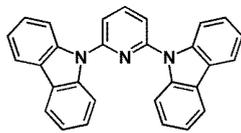
CDBP



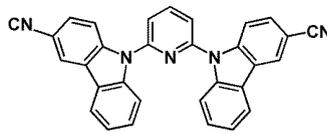
TCP



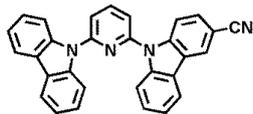
mCP



H50



H51



H52

[0322]

[0323]

[0324]

[0325]

[0326]

[0327]

[0328]

[0329]

[0330]

[0331]

[0332]

상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 또는, 상기 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및/또는 청색 발광층이 적층된 구조를 가짐으로써, 백색광을 방출할 수 있는 등 다양한 변형예가 가능하다.

상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

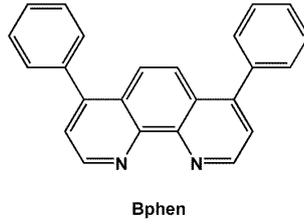
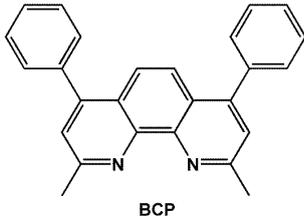
다음으로 발광층 상부에 전자 수송 영역이 배치된다.

전자 수송 영역은 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 또는 이의 임의의 조합을 포함할 수 있다.

예를 들어, 전자 수송 영역은 정공 저지층/전자 수송층/전자 주입층 또는 전자 수송층/전자 주입층의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 전자 수송층은 단일층 또는 2 이상의 서로 다른 물질을 포함한 다층 구조를 가질 수 있다.

상기 전자 수송 영역의 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층의 형성 조건은 정공 주입층의 형성 조건을 참조한다.

상기 전자 수송 영역이 정공 저지층을 포함할 경우, 상기 정공 저지층은 예를 들면, 하기 BCP, Bphen 및 Balq 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



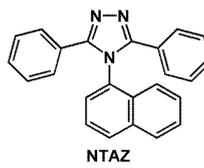
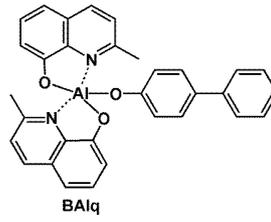
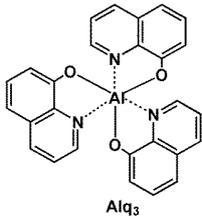
[0333]

[0334]

상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 진술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0335]

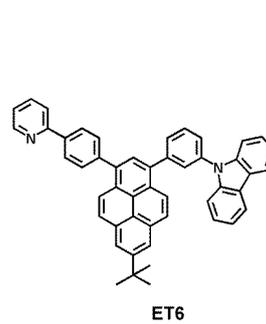
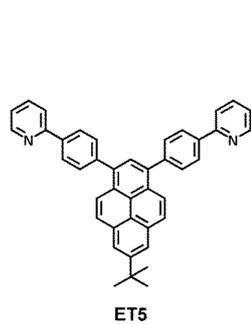
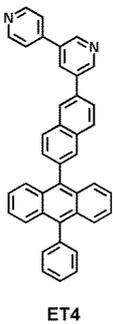
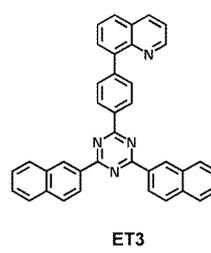
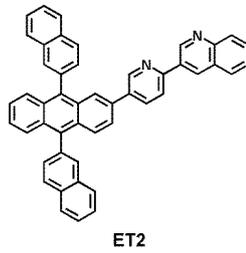
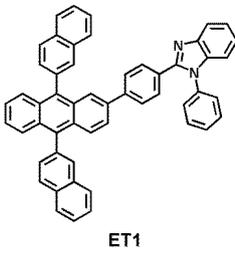
상기 전자 수송층은 상기 BCP, Bphen, Alq<sub>3</sub>, Balq, TAZ 및 NTAZ 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다.



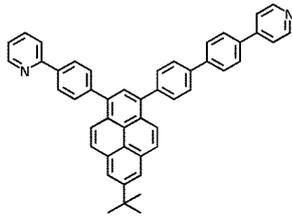
[0336]

[0337]

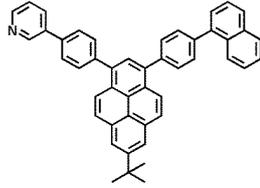
또는, 상기 전자 수송층은 하기 화합물 ET1 내지 ET25 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



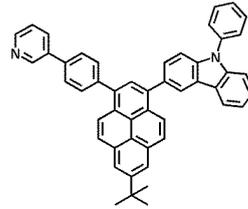
[0338]



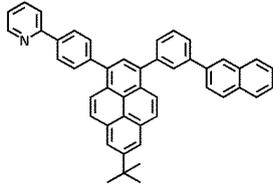
ET7



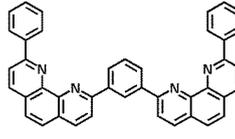
ET8



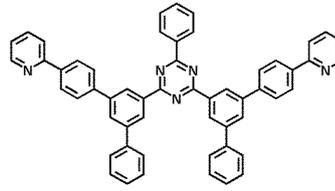
ET9



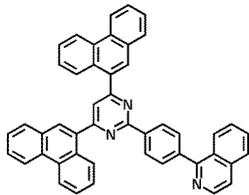
ET10



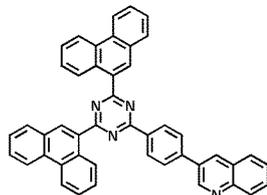
ET11



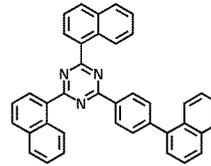
ET12



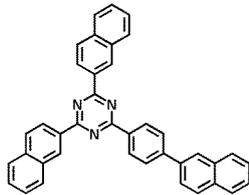
ET13



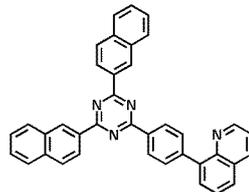
ET14



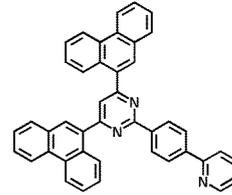
ET15



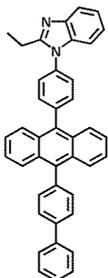
ET16



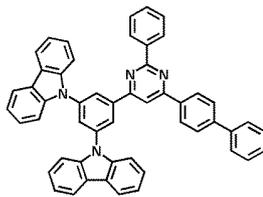
ET17



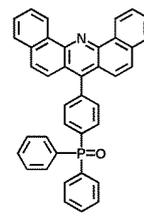
ET18



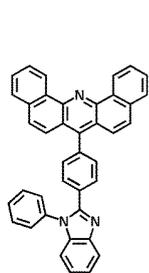
ET19



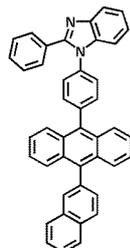
ET20



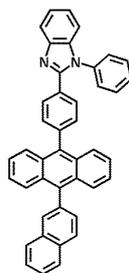
ET21



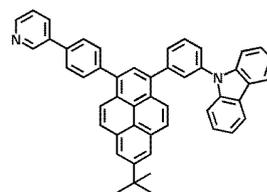
ET22



ET23



ET24



ET25

[0339]

[0340]

[0341]

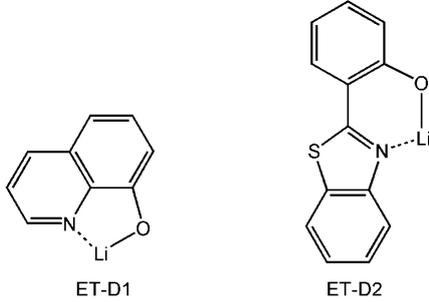
[0342]

상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전

자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0343] 상기 전자 수송층은 상술한 바와 같은 물질 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0344] 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체는, 예를 들면, 하기 화합물 ET-D1(LiQ) 또는 ET-D2를 포함할 수 있다.



[0345]

[0346] 또한 전자 수송 영역은, 제2전극(19)으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 전자 주입층(EIL)을 포함할 수 있다.

[0347] 상기 전자 주입층은, LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O 및 BaO 중에서 선택된 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0348] 상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 예를 들면, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0349] 상기 유기층(15) 상부로는 제2전극(19)이 구비되어 있다. 상기 제2전극(19)은 캐소드일 수 있다. 상기 제2전극(19)용 물질로는 상대적으로 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 조합을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 제2전극(19) 형성용 물질로 사용할 수 있다. 또는, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용하여 투과형 제2전극(19)을 형성할 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0350] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0351] 또 다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물을 1종 이상 포함한, 진단용 조성물이 제공된다.

[0352] 상기 화학식 1로 표시되는 유기금속 화합물은 고발광 효율을 제공할 수 있으므로, 상기 유기금속 화합물을 포함한 진단용 조성물은 높은 진단 효율을 가질 수 있다.

[0353] 상기 진단용 조성물은, 각종 진단용 키트, 진단 시약, 바이오 센서, 바이오 마커 등에 다양하게 응용될 수 있다.

[0354] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기는 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 포화 지방족 탄화수소 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 구체적인 예에는, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다.

[0355] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기는 -OA<sub>101</sub>(여기서, A<sub>101</sub>은 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기임)의 화학식을 갖는 1가 그룹을 의미하며, 이의 구체적인 예에는, 메톡시기, 에톡시기, 이소프로필옥시기 등이 포함된다.

[0356] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기 등이 포함된다. 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

[0357] 본 명세서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간 또는 말단에 하나 이상의 탄소-탄소 삼중 결합을 포함한 구조를 가지며, 이의 구체적인 예에는, 에티닐기(ethynyl), 프로피닐기(propynyl), 등이 포함된다. 본 명세

서 중 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬닐렌기는 상기 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.

- [0358] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기는 탄소수 3 내지 10의 1가 포화 탄화수소 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 시클로헵틸기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0359] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 테트라히드로푸라닐기(tetrahydrofuranyl), 테트라히드로티오펜일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0360] 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기는 탄소수 3 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지나, 방향족성(aromaticity)을 갖지 않는 그룹을 의미하며, 이의 구체예는 시클로펜테닐기, 시클로헥세닐기, 시클로헵테닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐렌기는 상기 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0361] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함한 탄소수 1 내지 10의 1가 모노시클릭 그룹으로서, 고리 내에 적어도 하나의 이중 결합을 갖는다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기의 구체예는, 2,3-디히드로푸라닐기, 2,3-디히드로티오펜일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐렌기는 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기와 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0362] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기는 탄소 원자수 6 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 구체예는, 페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기 등을 포함한다. 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.
- [0363] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로방향족 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기는 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 고리-형성 원자로서 포함하고 탄소수 1 내지 60개의 헤테로방향족 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기의 구체예는, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함한다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다.
- [0364] 본 명세서 중 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기는 -OA<sub>102</sub>(여기서, A<sub>102</sub>는 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리키고, 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기(arylthio)는 -SA<sub>103</sub>(여기서, A<sub>103</sub>은 상기 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리킨다.
- [0365] 본 명세서 중 1가 비-방향족 축합다환 그룹(non-aromatic condensed polycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 8 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹의 구체예는 플루오레닐기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을 의미한다.
- [0366] 본 명세서 중 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹(non-aromatic condensed heteropolycyclic group)은 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)을 갖는 1가 그룹(예를 들면, 1 내지 60의 탄소수를 가짐)을 의미한다. 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은, 카바졸일기 등을 포함한다. 본 명세서 중 2가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹은 상기 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹과 동일한 구조를 갖는 2가 그룹을

의미한다.

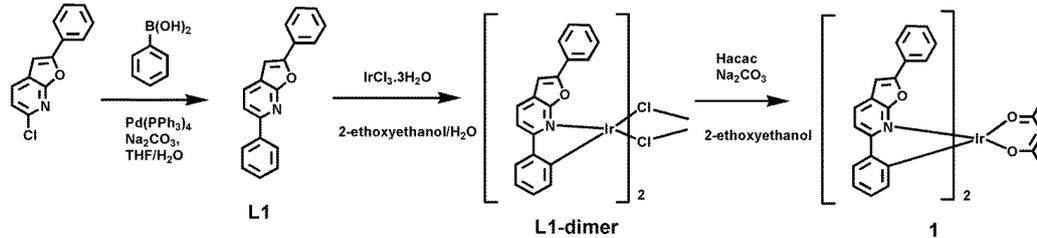
- [0367] 본 명세서 중 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 5 내지 30개의 탄소만을 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0368] 본 명세서 중 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹은 고리 형성 원자로서 1 내지 30개의 탄소 외에, N, O, P, Si 및 S 중에서 선택된 헤테로 원자를 적어도 하나 갖는 포화 또는 불포화 시클릭 그룹을 가리킨다. 상기 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹은 모노시클릭 그룹 또는 폴리시클릭 그룹일 수 있다.
- [0369] 상기 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>30</sub>카보시클릭 그룹, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>헤테로시클릭 그룹, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, 치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 치환된 1가 비-방향족 축합다환 그룹 및 치환된 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹의 치환기는,
- [0370] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0371] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), -Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>), -B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기;
- [0372] C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0373] 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, -CD<sub>3</sub>, -CD<sub>2</sub>H, -CDH<sub>2</sub>, -CF<sub>3</sub>, -CF<sub>2</sub>H, -CFH<sub>2</sub>, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹, 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹, -N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>), -Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>), -B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>) 및 -P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>) 중에서 선택된 적어도 하나로 치환된, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹;
- [0374] -N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>), -Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>), -B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>) 또는 -P(=O)(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>); 또는
- [0375] 이의 임의의 조합;
- [0376] 이고,
- [0377] 상기 Q<sub>1</sub> 내지 Q<sub>9</sub>, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>19</sub>, Q<sub>21</sub> 내지 Q<sub>29</sub> 및 Q<sub>31</sub> 내지 Q<sub>39</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, -F, -Cl, -Br, -I, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실산기 또는 이의 염, 술폰산기 또는 이의 염, 인산기 또는 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알킬기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알킬기, C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>시클로알케닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>헤테로시클로알케닐

기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기 및 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 중 적어도 하나로 치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴티오기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, 1가 비-방향족 축합다환 그룹 또는 1가 비-방향족 헤테로축합다환 그룹이다.

[0378] 이하, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 화합물 및 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 하기 합성에 중 "A" 대신 "B"를 사용하였다"란 표현 중 'B'의 사용량과 'A'의 사용량은 몰당량 기준으로 동일하다.

[0379] [실시예]

[0380] **합성에 1 (화합물 1)**



[0381]

[0382] **중간체 L1의 합성**

[0383] 6-클로로-2-페닐퓨로[2,3-b]피리딘 (6-chloro-2-phenylfuro[2,3-b]pyridine) (2.55 g, 11.1 mmol), 페닐보론산 (phenylboronic acid) (2.603g, 16.64 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.03 g, 0.89 mmol) 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (3.83 g, 27.7 mmol)과 60 mL의 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran)과 30 mL의 증류수를 혼합한 다음, 90℃에서 18 시간 교반한 후, 실온까지 냉각시켰다. 이로부터 수득한 결과물로부터 에틸아세테이트를 사용하여 유기층을 추출하고 무수황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)를 첨가하여 수분을 제거한 다음 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물을 에틸아세테이트:헥산 = 1:2 조건에서 컬럼 크로마토그래피 방법을 통해서 정제하여 중간체 L1 (2.85 g, 83%)을 수득하였다.

[0384] LC-MS m/z = 272(M+H)<sup>+</sup>

[0385] **중간체 L1-dimer의 합성**

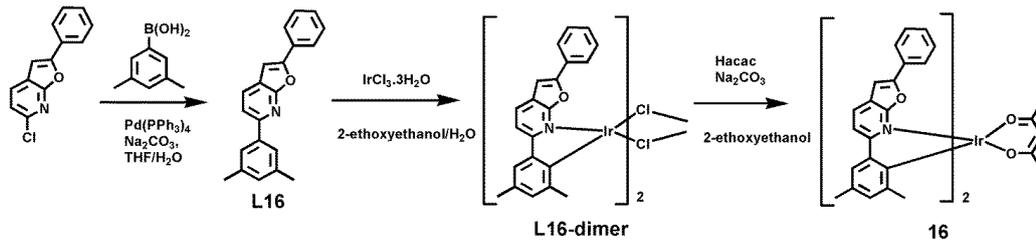
[0386] 중간체 L1 (1.99 g, 7.32 mmol) 와 이리듐 클로라이드 수화물(iridium chloride) (1.15 g, 3.25 mmol)에 21 mL의 에톡시에탄올(ethoxyethanol)과 7 mL의 증류수를 혼합한 다음, 120℃에서 24시간 동안 환류 교반하여 반응 진행 후, 상온까지 온도를 낮추었다. 이로부터 생성된 고형물을 여과하여 분리하고, 물/메탄올/hexane 순으로 충분히 세정하여 수득한 고체를 진공 오븐에서 건조하여 중간체 L1-dimer (1.95 g, 78%)를 수득하였다. 수득한 화합물은 추가적인 정제없이 다음 반응에서 사용하였다.

[0387] **화합물 1의 합성**

[0388] 중간체 L1-dimer (1.94 g, 1.26 mmol), 아세틸아세톤 (1.26 g, 12.6 mmol), 및 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (1.33 g, 12.6 mmol)에 30 mL의 2-에톡시에탄올을 넣은 다음, 상온에서 12 시간 동안 교반시켰다. 이로부터 수득한 결과물로부터 에틸아세테이트를 사용하여 유기층을 추출하고 무수황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)를 첨가하여 수분을 제거한 다음 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물을 다이클로로메탄:헥산 = 1:4 조건에서 컬럼 크로마토그래피 방법을 통해서 정제하여 화합물 1 (0.451 g, 22%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0389] HRMS(MALDI-TOF) calcd for C<sub>43</sub>H<sub>31</sub>IrN<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: m/z 832.1913, Found: 832.1913.

[0390] **합성예 2 (화합물 16)**



[0391]

[0392] **중간체 L16의 합성**

[0393] 6-클로로-2-페닐퓨로[2,3-b]피리딘 (6-chloro-2-phenylfuro[2,3-b]pyridine) (2.69 g, 11.71 mmol), 3,5-디메틸페닐보론산 (3,5-dimethylphenyl)boronic acid (2.64 g, 17.56 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (1.08 g, 0.94 mmol) 및 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.05 g, 29.3 mmol)와 60 mL의 테트라하이드로퓨란(tetrahydrofuran) 과 30 mL의 증류수를 혼합한 다음, 90℃에서 18 시간 교반한 후, 실온까지 냉각시켰다. 이로부터 수득한 결과물로부터 에틸아세테이트를 사용하여 유기층을 추출하고 무수황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)를 첨가하여 수분을 제거한 다음 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물을 에틸아세테이트:헥산 = 1:2 조건에서 컬럼 크로마토그래피 방법을 통해서 정제하여 중간체 L16 (1.97 g, 56%)을 수득하였다.

[0394] LC-MS m/z = 300 (M+H)<sup>+</sup>

[0395] **중간체 L16-dimer의 합성**

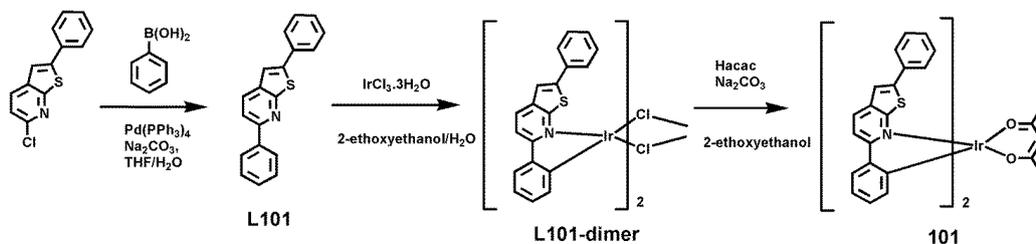
[0396] 중간체 L16 (1.97 g, 6.82 mmol) 와 이리듐 클로라이드 수화물(iridium chloride) (1.07 g, 3.03 mmol)에 21 mL의 에톡시에탄올(ethoxyethanol)과 7 mL의 증류수를 혼합한 다음, 120℃에서 24시간 동안 환류 교반하여 반응 진행 후, 상온까지 온도를 낮추었다. 이로부터 생성된 고형물을 여과하여 분리하고, 물/메탄올/hexane 순으로 충분히 세정하여 수득한 고체를 진공 오븐에서 건조하여 중간체 L16-dimer (2.16 g, 86%)를 수득하였다. 수득한 화합물은 추가적인 정제없이 다음 반응에서 사용하였다.

[0397] **화합물 16의 합성**

[0398] 중간체 L16-dimer (2.15 g, 1.31 mmol), 아세틸아세톤 (1.31 g, 13.1 mmol), 및 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (1.38 g, 13.1 mmol)에 30 mL의 2-에톡시에탄올을 넣은 다음, 상온에서 12 시간 동안 교반시켰다. 이로부터 수득한 결과물로부터 에틸아세테이트를 사용하여 유기층을 추출하고 무수황산마그네슘(MgSO<sub>4</sub>)를 첨가하여 수분을 제거한 다음 여과하여 수득한 여과액을 감압하여 수득한 잔류물을 다이클로로메탄:헥산 = 1:4 조건에서 컬럼 크로마토그래피 방법을 통해서 정제하여 화합물 16 (0.47 g, 20%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0399] HRMS(MALDI-TOF) calcd for C<sub>47</sub>H<sub>39</sub>IrN<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: m/z 888.2539, Found: 888.2538.

[0400] **합성예 3 (화합물 101)**



[0401]

[0402] **중간체 L101의 합성**

[0403] 6-클로로-2-페닐퓨로[2,3-b]피리딘 (6-chloro-2-phenylfuro[2,3-b]pyridine) (2.55 g, 11.1 mmol) 대신 6-클로로-2-페닐싸이아놀[2,3-b]피리딘 (6-chloro-2-phenylthieno[2,3-b]pyridine) (2.99 g, 12.2 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1의 중간체 L1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L101 (2.08

g, 59%)을 수득하였다.

[0404] LC-MS  $m/z = 288(M+H)^+$ .

[0405] 중간체 L101-dimer의 합성

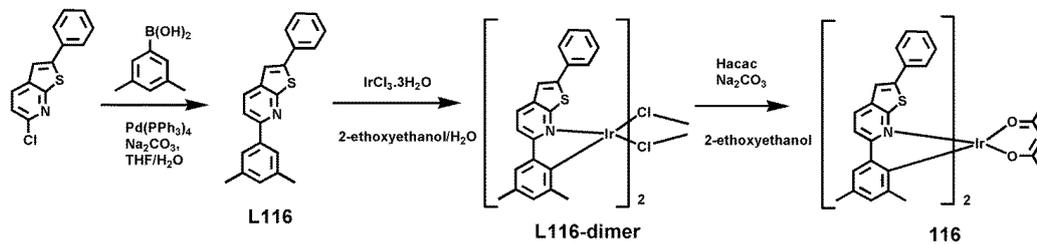
[0406] 중간체 L1 대신 중간체 L101 (1.97 g, 7.03 mmol) 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 중간체 L1-dimer의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L101-dimer (2.16 g, 86%)을 수득하였다.

[0407] 화합물 101의 합성

[0408] 중간체 L1-dimer 대신 중간체 L101-dimer (1.95 g, 1.22 mmol) 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1의 화합물 1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 101 (0.47 g, 22%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0409] HRMS(MALDI-TOF) calcd for  $C_{43}H_{30}IrN_2O_2S_2$ :  $m/z$  863.1378, Found: 863.1377.

[0410] 합성예 4 (화합물 116)



[0411]

[0412] 중간체 L116의 합성

[0413] 6-클로로-2-페닐퓨로[2,3-b]피리딘 (6-chloro-2-phenylfuro[2,3-b]pyridine) (2.69 g, 11.71 mmol) 대신 6-클로로-2-페닐싸이아놀[2,3-b]피리딘 (6-chloro-2-phenylthieno[2,3-b]pyridine) (2.73 g, 11.1 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 중간체 L16의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L116 (3.00 g, 86%)을 수득하였다.

[0414] LC-MS  $m/z = 316 (M+H)^+$ .

[0415] 중간체 L116-dimer의 합성

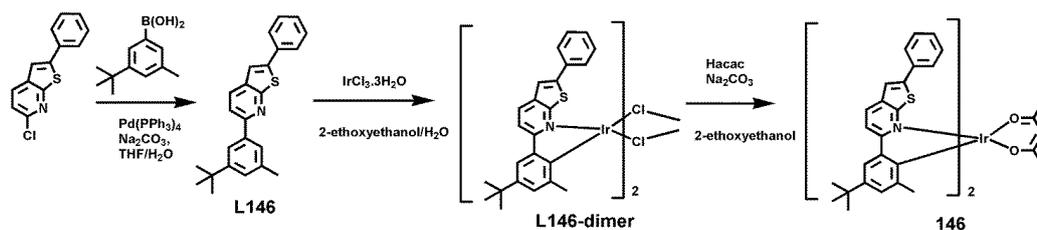
[0416] 중간체 L16 대신 중간체 L116 (2.48 g, 7.88 mmol) 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 중간체 L16-dimer의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L116-dimer (2.16 g, 72%)을 수득하였다

[0417] 화합물 116의 합성

[0418] 중간체 L16-dimer 대신 중간체 L116-dimer (2.04 g, 1.19 mmol) 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 화합물 16의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 116 (0.47 g, 21%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0419] HRMS(MALDI-TOF) calcd for  $C_{47}H_{39}IrN_2O_2S_2$ :  $m/z$  920.2082, Found: 920.2080.

[0420] 합성예 5 (화합물 146)



[0421]

[0422] 중간체 L146의 합성

[0423] 3,5-디메틸페닐보론산 (3,5-dimethylphenyl)boronic acid (2.64 g, 17.56 mmol), 대신 3-tert부틸-5-메틸페닐

보로닉산 (3-(tert-butyl)-5-methylphenyl)boronic acid (3.23 g, 16.8 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 4의 중간체 L116의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L146 (3.30 g, 83%)을 수득하였다.

[0424] LC-MS  $m/z = 358 (M+H)^+$ .

[0425] 중간체 L146-dimer의 합성

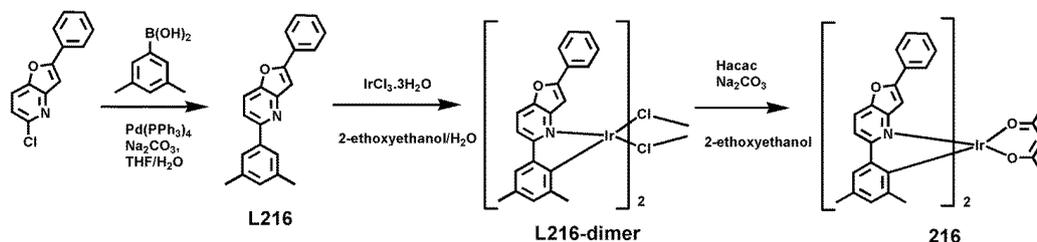
[0426] 중간체 L116 대신 중간체 L146 (2.99 g, 8.37 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 4의 중간체 L116-dimer의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L146-dimer (2.60 g, 74%)을 수득하였다

[0427] 화합물 146의 합성

[0428] 중간체 L116-dimer 대신 중간체 L146-dimer (2.04 g, 1.19 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 화합물 16의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 146 (0.48 g, 20%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0429] HRMS(MALDI-TOF) calcd for  $C_{47}H_{38}IrN_2O_2 S_2$ :  $m/z$  919.2004, Found: 919.2003

[0430] 합성예 6 (화합물 216)



[0431]

[0432] 중간체 L216의 합성

[0433] 6-클로로-2-페닐퓨로[2,3-b]피리딘 (6-chloro-2-phenylfuro[2,3-b]pyridine) (2.69 g, 11.71 mmol) 대신 5-클로로-2-페닐퓨로[3,2-b]피리딘 (5-chloro-2-phenylfuro[3,2-b]pyridine) (2.69 g, 11.71 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 중간체 L16의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L216 (3.00 g, 86%)을 수득하였다.

[0434] LC-MS  $m/z = 300 (M+H)^+$

[0435] 중간체 L216-dimer의 합성

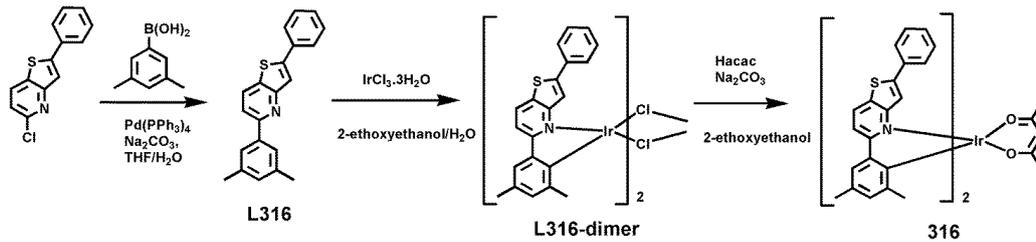
[0436] 중간체 L16 대신 중간체 L216 (2.86 g, 9.55 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 중간체 L16-dimer의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L216-dimer (3.2 g, 91%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 추가적인 정제없이 다음 반응에서 사용하였다.

[0437] 화합물 216의 합성

[0438] 중간체 L16-dimer 대신 중간체 L216-dimer (2.04 g, 1.24 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2의 화합물 16의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 216 (0.75 g, 34%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0439] HRMS(MALDI-TOF) calcd for  $C_{47}H_{39}IrN_2O_4$ :  $m/z$  888.2539, Found: 888.2539.

[0440] **합성예 7 (화합물 316)**



[0441]

[0442] 중간체 L316의 합성

[0443] 5-클로로-2-페닐퓨로[2,3-c]피리딘 (5-chloro-2-phenylfuro[2,3-c]pyridine) (2.69 g, 11.71 mmol) 대신 5-클로로-2-페닐싸이예노[3,2-b]피리딘 (5-chloro-2-phenylthieno[3,2-b]pyridine) (3.12 g, 12.7 mmol)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2의 중간체 L16의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L316 (3.01 g, 76%)을 수득하였다.

[0444] LC-MS  $m/z = 316 (M+H)^+$ .

[0445] 중간체 L316-dimer의 합성

[0446] 중간체 L16 대신 중간체 L316 (2.89 g, 9.19 mmol) 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2의 중간체 L16-dimer의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 중간체 L316-dimer (2.60 g, 74%)을 수득하였다.

[0447] 화합물 316의 합성

[0448] 중간체 L16-dimer 대신 중간체 L316-dimer (2.23 g, 1.30 mmol) 을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2의 화합물 16의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여, 화합물 316 (0.49 g, 20%)을 수득하였다. 수득한 화합물은 Mass와 HPLC 분석을 통해 물질을 확인하였다.

[0449] HRMS(MALDI-TOF) calcd for  $C_{47}H_{39}IrN_2O_2 S_2$ :  $m/z$  920.2082, Found: 920.2080.

[0450] **평가예 1 : 방사 감쇠율(radiative decay rate) 평가**

[0451] CBP와 화합물 16을 9 : 1의 중량비로  $10^{-7}$  torr의 진공도에서 공증착하여 40nm 두께의 필름을 제작하였다.

[0452] 상기 필름에 대하여, PicoQuant사의 TRPL 측정시스템인 FluoTime 300과 PicoQuant사의 pumping source인 PLS340 (여기 파장 = 340 나노미터, spectral width = 20나노미터)을 이용하여, PL 스펙트럼을 상온에서 평가한 후, 상기 스펙트럼의 main peak의 파장을 결정하고, PLS340이 상기 필름에 가하는 photon pulse (pulse width = 500 피코초)에 의해 상기 필름으로부터 main peak의 파장에서 방출되는 photon의 개수를 Time-Correlated Single Photon Counting (TCSPC)을 기반으로 시간에 따라 측정하는 것을 반복하여, fitting이 충분히 가능한 TRPL 커브를 구하였다. 이로부터 얻은 결과에 하나 이상의 exponential decay function을 fitting하여 상기 필름의 감쇠 시간(decay time,  $T_{decay}$ )을 구하였다. Fitting에 사용되는 function은 하기 <식 10>과 같고, fitting에 사용된 각 exponential decay function으로부터 얻은 값들 중 최대값을  $T_{decay}$ 로 취하였다. 이때, TRPL 커브를 구하기 위한 측정 시간과 동일한 측정 시간동안 동일한 측정을 dark상태(상기 소정의 필름으로 입사되는 pumping signal을 차단한 상태임)에서 한 번 더 반복하여 baseline 혹은 background signal 커브를 얻어 fitting에 baseline으로 사용하였다.

[0453] <식 10>

$$f(t) = \sum_{i=1}^n A_i \exp(-t/T_{decay,i})$$

[0454]

[0455] 이어서, 상기 필름의 quantum efficiency를 Hamamatsu社의 Quantaurus-QY Absolute PL quantum yield spectrometer (제논 광원(xenon light source), 모노크로메터(monochromator), 포토닉 멀티채널 분석기(photonic multichannel analyzer), 및 적분구(integrating sphere)가 장착되어 있고, PLQY measurement

software (Hamamatsu Photonics, Ltd., Shizuoka, Japan)를 채용하였음)를 이용하여 측정하였다. quantum efficiency 측정 시 여기 파장은 320nm에서 380nm까지 10nm 간격으로 스캔하면서 측정하였고, 이 중 최대값을 quantum efficiency ( $\Phi$ )로 취하였다.

[0456] 이상으로부터 얻은 Tdecay 및  $\Phi$ 를 <식 11>에 대입하여, 화합물 1의 방사 감쇠율( $k_r$ )을 구하고, 그 결과를 표 2에 나타내었다.

[0457] <식 11>

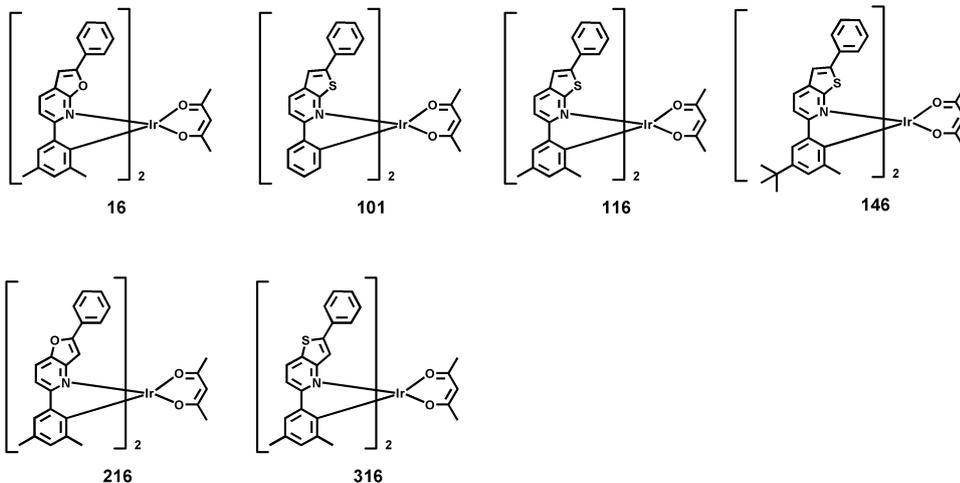
[0458]  $k_r = \Phi / T_{decay}$

[0459] 상기 방사 감쇠율 측정을 화합물 101, 116, 146, 216, 316, A1, A2, B, C1, C2 및 D에 대하여 각각 반복하여, 그 결과를 표 2에 기재하였다.

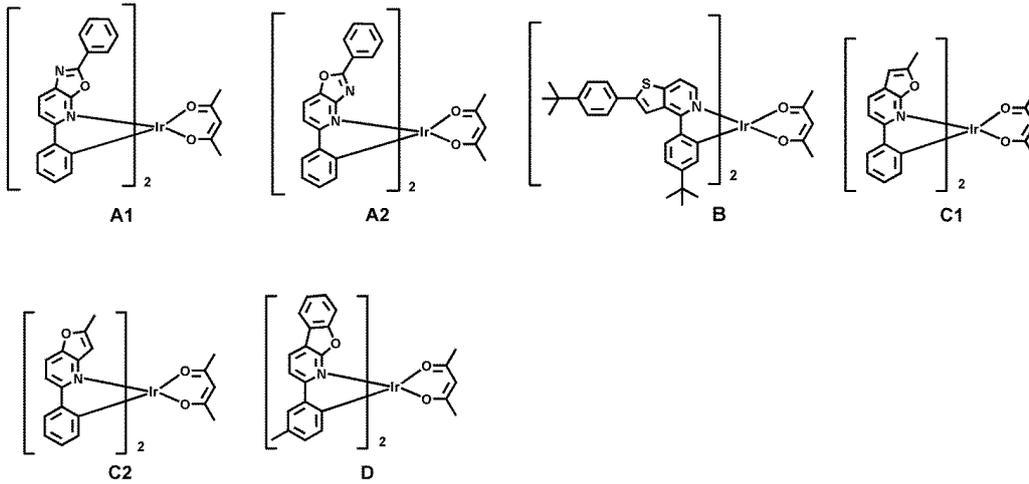
표 2

[0460]

화합물 No.	방사 감쇠율( $s^{-1}$ ) (Radiative decay rate)
16	$4.72 \times 10^5$
101	$5.68 \times 10^5$
116	$7.09 \times 10^5$
146	$6.72 \times 10^5$
216	$1.22 \times 10^6$
316	$1.56 \times 10^6$
A1	$4.08 \times 10^5$
A2	$4.15 \times 10^5$
B	$4.62 \times 10^5$
C1	$1.85 \times 10^5$
C2	$3.52 \times 10^5$
D	$2.13 \times 10^5$



[0461]



[0462]

[0463]

표 2로부터, 화합물 화합물 16, 101, 116, 146, 216, 및 316은 화합물 A1, A2, B, C1, C2 및 D에 비하여 높은 방사 감쇠율을 가짐을 확인할 수 있다.

[0464]

**실시예 1**

[0466]

에노드로서 ITO/Ag/ITO가 70/1000/70Å 두께로 증착된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하여 진공 증착 장치에 설치하였다.

[0467]

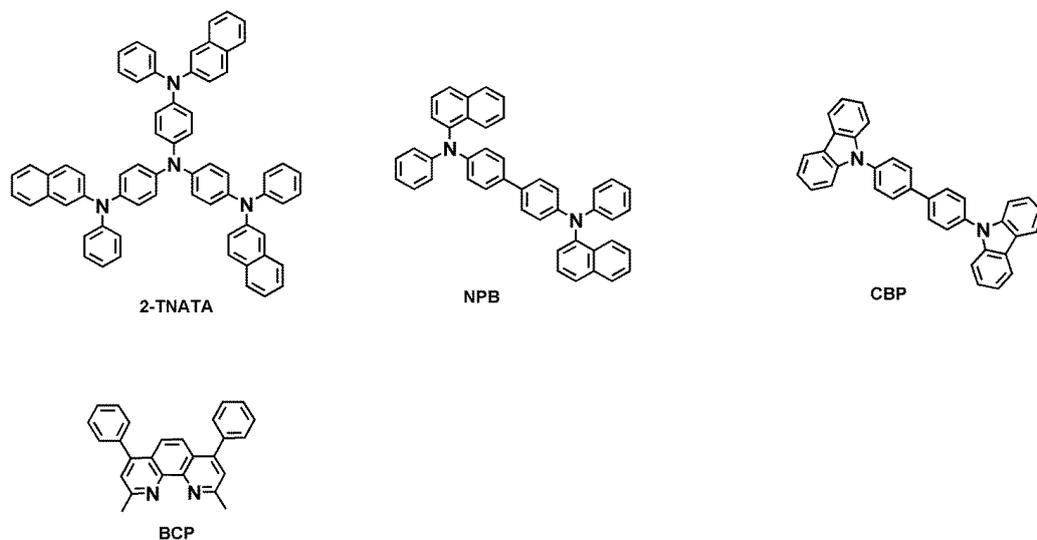
상기 에노드 상에 2-TNATA를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, NPB)을 진공 증착하여 1350Å의 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0468]

이어서, 상기 정공 수송층 상에 CBP(호스트) 및 화합물 16(도펀트)를 98 : 2의 중량비로 공증착하여 400Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0469]

이 후, 상기 발광층 상에 BCP를 진공 증착하여 50Å 두께의 정공 저지층을 형성한 다음, 상기 정공 저지층 상에 Alq<sub>3</sub>를 진공 증착하여 350Å 두께의 전자 수송층을 형성한 후, 상기 전자 수송층 상에 LiF를 진공 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상에 Mg 및 Ag를 90:10의 중량비로 공증착하여 120Å 두께의 캐소드를 형성함으로써, 유기 발광 소자(적색광 방출)를 제작하였다.



[0470]

**실시예 2 내지 6과 비교예 A1, A2, B, C1, C2 및 D**

[0472]

발광층 형성시 도펀트로서 화합물 16 대신 표 3에 기재된 화합물을 각각 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기

실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0473] **평가예 2: 유기 발광 소자의 특성 평가**

[0474] 상기 실시예 1 내지 6과 비교예 A1, A2, B, C1, C2 및 D에서 제조된 각각의 유기 발광 소자에 대하여 구동 전압, 외부 양자 발광 효율의 최대값(Max EQE), 롤-오프비(Roll-Off ratio), EL 스펙트럼의 메인 피크의 최대 발광 파장 및 수명(T<sub>97</sub>)을 평가하여 그 결과를 표 3에 나타내었다. 평가 장치로서 전류-전압계(Keithley 2400) 및 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 사용하였고, 수명(T<sub>97</sub>)은 초기 휘도 100% 대비 97%의 휘도가 되는 데 걸리는 시간을 평가하였다. 롤-오프비는 하기 식 20에 따라 계산하였다.

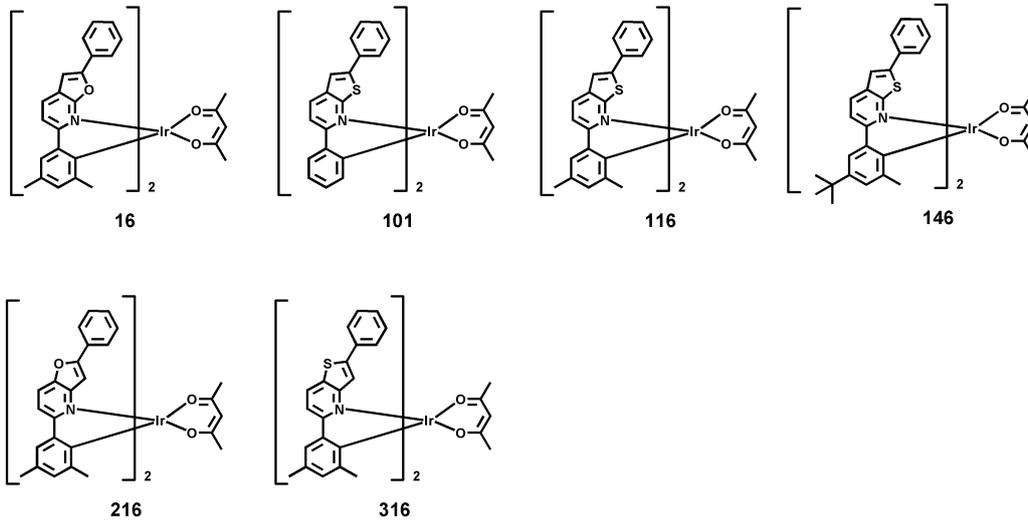
[0475] <식 20>

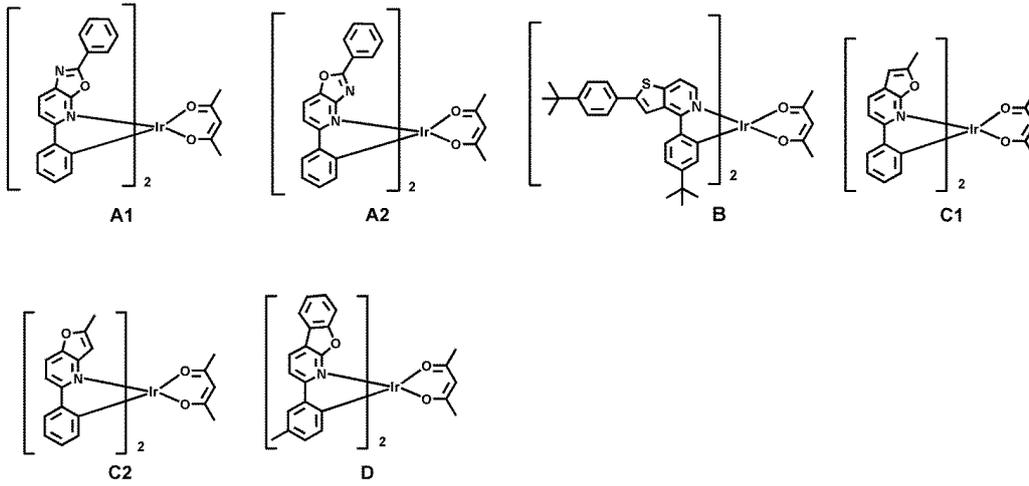
[0476] 
$$\text{Roll off ratio} = \{1 - (\text{효율 (at 3500nit)} / \text{최대 발광 효율})\} \times 100\%$$

**표 3**

[0477]

	발광층 중 도펀트의 화합물 No.	구동전압 (V)	Max EQE (%)	Roll-Of ratio (%)	최대 발광 파장 (nm)	LT <sub>97</sub> (hr) (at 3500nit)
실시예 1	16	3.74	26.5	10	606	144
실시예 2	101	3.64	26.9	11	555	107
실시예 3	116	3.74	27.6	10	581	157
실시예 4	146	4.17	26.4	11	557	156
실시예 5	216	4.28	27.9	5	581	181
실시예 6	316	4.20	31.5	2	576	258
비교예 A1	A1	5.75	24.1	19	575	85
비교예 A2	A2	5.84	24.7	14	614	86
비교예 B	B	4.3	26.0	12	580	60
비교예 C1	C1	5.22	24.4	32	514	48
비교예 C2	C2	5.59	25.4	15	505	48
비교예 D	D	4.34	24.6	28	555	69





[0479]

[0480]

상기 표 3으로부터, 실시예 1 내지 6의 유기 발광 소자는 적색광을 방출하면서, 비교예 A1, A2, B, C1, C2 및 D의 유기 발광 소자에 비하여 향상된, 구동 전압, 외부 양자 효율, 플-오프비 및 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

**부호의 설명**

[0481]

- 10: 유기 발광 소자
- 11: 제1전극
- 15: 유기층
- 19: 제2전극

**도면**

**도면1**

